Краткие сообщения по физике № 4 1983

О НЕКОТОРЫХ СВОЙСТВАХ UV-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ БОГОЛЮБОВА

А. С. Бруев

УДК 530.145.7; 539.2

Показано, что для гамильтонианов, приводящихся к диагональному виду преобразованием Боголюбова, собственная энергия СЭ имеет один простой полюс в плоскости значений константы связи.

Как хорошо известно /1/, теоретико-полевой способ определения дисперсии элементарных возбуждений в системе многих тел сводится к нахождению полюсов функции Грина (ФГ). В пренебрежении затуханием квазичастичных волновых функций, для нахождения закона дисперсии применяют стандартный метод канонического преобразования гамильтониана. Покажем, что в тех случаях, когда использование канонического преобразования дает точное решение задачи, собственная энергия (СЭ) как функция константы связи g имеет один простой полюс в комплексной g-плоскости.

1. Рассмотрим одномерный кристалл с одним атомом в элементарной ячейке. Гамильтониан линейной цепочки из N одинаковых атомов, расположенных на расстоянии a друг от друга, записанный в гармоническом приближении, имеет следующую форму

$$H_N = \omega_0 \left\{ \sum_p b_p^+ b_p - \frac{1}{2} \sum_{p>0} (b_p + b_{-p}^+)(b_{-p} + b_p^+) \cos pa \right\}, \qquad (1)$$

где b_p^+, b_p – операторы рождения и уничтожения эйнштейновских фононов (квантов возбуждения), удовлетворяющие бозевским соотношениям коммутации, ω_0 – частота эйнштейновского фонона, система единиц такова, что $\hbar = 1$. Если принять, что в состоянии с импульсом $-p$ фонон " распространяется" в обратном во времени направлении, то данная задача станет эквивалентной одночастичной задаче с внешним полем, которое изменяет закон дисперсии фононов. Для СЭ в рассматриваемом случае имеем точное выражение

$$\Sigma_{pp} = -(g\omega_0/2)\cos pd\left[1 - (g\omega_0/2)(\omega + \omega_0)^{-1}\cos pd\right]^{-1}. \quad (2)$$

Из (2) видно, что СЭ имеет один простой полюс в g-плоскости, обусловленный возможностью образования связанного состояния пары фононов при достаточно большом (нефизическом) значении g. Однако при $g = 1$, т.е. для гамильтониана (I) на энергетической поверхности Σ_{pp} полюсов не имеет, что, очевидно, означает невозможность локализации фонона.

2. Пусть в ячейке одномерного кристалла находятся два атома массы m_α и m_β. В гармоническом приближении гамильтониан задачи имеет следующий вид

$$H_N = H_N^{(0)} + V_N, \quad H_N^{(0)} = \omega_{0\alpha}\sum_p b^+_{p\alpha}b_{p\alpha} + \omega_{0\beta}\sum_p b^+_{p\beta}b_{p\beta};$$

$$V_N = -\frac{1}{4}(\omega_{0\alpha}\omega_{0\beta})^{1/2}\sum_{p>0}(b_{p\alpha} + b^+_{-p\alpha})(b_{-p\beta} + b^+_{p\beta})(1 + e^{ipd}) +$$

$$+ \text{э.с.},$$

где э.с. – эрмитово сопряжение, $b^+_{p\alpha}$, $b_{p\alpha}$ – операторы рождения и уничтожения эйнштейновских фононов типа α. Рассматриваемый пример также сводится к одночастичной задаче с внешним полем, причем выражение для СЭ имеет следующий вид

$$\Sigma_{p\alpha,p\alpha} = -\frac{g\omega_{0\beta}}{4}\frac{\omega_{0\alpha}\omega_{0\beta}}{\omega^2 - \omega^2_{0\beta}}(1 + \cos pd)\times$$

$$\times\left[1 - \frac{g\omega_{0\beta}}{4}\frac{\omega_{0\alpha}\omega_{0\beta}}{\omega^2 - \omega^2_{0\beta}}(1 + \cos pd)(\omega + \omega_{0\alpha})^{-1}\right]^{-1}. \quad (3)$$

Видно, что СЭ имеет один простой полюс в g-плоскости. Его появление, также как и в предыдущем случае, обусловлено возможностью образования связанных состояний для пар, состоящих из фононов разного типа. Отметим, что связанное состояние имеется и при физическом значении $g = 1$. Чтобы найти энергию связанного состояния, рассмотрим полюс СЭ на энергетической поверхности и положим

$$\omega = \omega_{0\alpha} = -\varepsilon, \tag{4а}$$

$$\omega_{0\beta} \to |\omega_{0\beta} - \omega_{0\alpha}|, \tag{4б}$$

где второе соотношение обусловлено тем, что нуль энергии соответствует значению $\omega = \omega_{0\alpha}$. В соответствии с (3) и (4) находим

$$\varepsilon = |\omega_{0\beta} - \omega_{0\alpha}| \left[1 + \frac{1}{8}\,(1 + \cos pd)\right]^{1/2}.$$

Связанные пары эйнштейновских фононов, распространяясь, образуют элементарные возбуждения, закон дисперсии которых определяется полюсом ФГ.

3. В случае разреженного бозе-газа при близких к нулю температурах имеем

$$H_N = \sum_{\vec p} \varepsilon^{(0)}_{\vec p} b^+_{\vec p} b_{\vec p} + \frac{1}{V} \sum_{\vec q, \vec p < \vec p_1} U_q b^+_{\vec p + \vec q} b^+_{\vec p_1 - \vec q} b_{\vec p} b_{\vec p_1}, \tag{5}$$

где U_q - фурье-образ потенциала взаимодействия пары бозонов, а $\varepsilon^{(0)}_p$ имеет обычный смысл. Следуя работе /2/, гамильтониан (5) запишем в виде

$$H_N = \sum_{\vec p} \varepsilon^{(0)}_{\vec p} b^+_{\vec p} b_{\vec p} + \frac{N^2}{2V} U_0 + \frac{N}{V} \sum_{\vec q > 0} U_q \left[b_{\vec q} + b^+_{-\vec q}\right]\left[b_{-\vec q} + b^+_{\vec q}\right] + H''_N,$$

где H''_N составлен из форм третьего и четвертого порядков по отношению к бозевским операторам $b^+_{\vec p}$, $b_{\vec p}$ и считается малым в рассматриваемом приближении. Пренебрегая H''_N для СЭ получаем

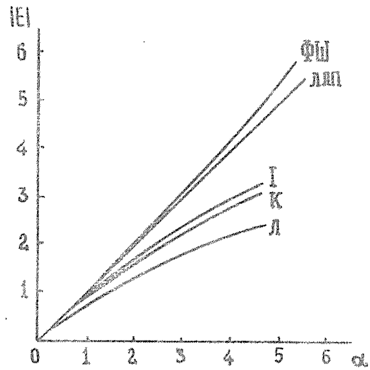
$$\Sigma_{pp} = g\,\frac{N}{V}\,U_p\left[1 + g\,\frac{N}{V}\,U_p(\omega + \varepsilon_p^{(0)})^{-1}\right]^{-1}.$$

Полюс СЭ на энергетической поверхности при $g = 1$ дает энергию связанного состояния

$$\varepsilon = (N/2V)U_p,$$

которое возникает только при $U_p > 0$, т.е. для потенциала отталкивания. При $p \to 0$, $U_p < 0$ связанное состояние неустойчиво, так как соответствующая энергия связи отрицательна.

Приведенные простые примеры показывают, что в тех случаях, когда закон дисперсии возбуждений получается с помощью UV-преобразования, СЭ имеет один простой полюс в комплексной g-плоскости. Если точная диагонализация гамильтониана невозможна, тем не менее следует ожидать, что аппроксимация для СЭ, учитывающая первый полюс в g-плоскости, будет эффективна при $|g| \leq |g_{1p}|$, где g_{1p} отвечает появлению первого связанного состояния. Это утверждение можно проиллюстрировать на примере известной задачи о поляроне большого радиуса. На рис. I представлены результаты



Р и с. I. Энергия полярона: Ф-Ш - расчет Фейнмана - Шульца, ЛЛП - расчет Ли - Лоу - Пайнса, Л - "линейная" аппроксимация СЭ, К - "квадратичная" аппроксимация СЭ, I - аппроксимация СЭ, приближенно учитывающая полюс расчета энергии поляроиа с использованием следующих аппроксимаций для СЭ при $p = 0$:

$$\Sigma \approx \Sigma^{(Л)} = \alpha D^{(1)}, \qquad (6а)$$

$$\Sigma \approx \Sigma^{(К)} = \alpha D^{(1)} + \alpha^2 D^{(2)}, \qquad (6б)$$

$$\Sigma \approx \Sigma^{(1)} = \alpha D^{(1)}/[1 - \alpha D^{(2)}/D^{(1)}], \qquad (6в)$$

где α – поляронная константа связи, а $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ – члены степенного разложения СЭ по константе связи

$$D^{(1)} = -(1-\omega)^{-1/2};$$

$$D^{(2)} = -(1-\omega)^{-2}\left[\ln\frac{1+\xi^{-1/2}}{(1+2\xi^{-1/2})^{1/2}} - \frac{1}{2}(1+\xi)^{-1/2} + \right.$$

$$\left. + a_1K_1(\xi) + a_2K_2(\xi) + a_3K_3(\xi)\right]; \qquad (7)$$

$$K_1 = \frac{1+\xi^{1/2}}{(1+2\xi^{1/2})^{1/2}} - 1, \quad K_2 = \frac{1}{2\xi}\frac{1+\xi^{1/2}}{(1+2\xi^{1/2})^{3/2}} - K_1,$$

$$K_3 = \frac{3}{8\xi^2}\frac{1+\xi^{1/2}}{(1+2\xi^{1/2})^{5/2}} - K_2.$$

В выражениях (7) $\xi = (2-\omega)/(1-\omega)$, $a_1 = 0{,}995354$, $a_2 = -0{,}288679$, $a_3 = 0{,}079331$. Отметим, что точность выражения для $D^{(2)}$ не хуже 0,01%. На этом же рисунке для сравнения приведены результаты расчетов теории промежуточной связи Фейнмана /3/ и Ли, Лоу, Пайнса /4/. Видно, что аппроксимация (6в), приближенно учитывающая первый полюс СЭ, лучше линейной и квадратичной аппроксимацией и эффективно работает при $0 \leq \alpha \leq 1$.

Значение $\mathscr{E}_{1p}$, соответствующее появлению связанного состояния электрона, найдем, рассмотрев полюс СЭ на энергетической поверхности. В первом приближении имеем

$$\alpha_{1p}^{(1)} \simeq 1,94.$$

Следующее приближение получается с помощью аппроксимации, более точно передающей поведение СЭ вблизи полюса /5/

$$\Sigma \simeq \Sigma^{(2)} = \alpha D^{(1)} + \alpha^2 D^{(2)} [1 - \alpha D^{(3)}/D^{(2)}]^{-1}. \qquad (8)$$

Используя результаты расчета третьего порядка теории возмущений для энергии полярона /6/, в соответствии с (I4) находим

$$\alpha_{1p}^{(2)} \simeq 0,98,$$

что согласуется с характером представленных на рис. I зависимостей $E(\alpha)$.

Поступила в редакцию
26 октября I982 г.

Литература

I. В. М. Галицкий, А. Б. Мигдал, ЖЭТФ, 34, I39 (I958).
2. N. N. Bogolubov, Journ. of Phys., 9, 23 (1947).
3. R. P. Feynman, Phys. Rev., 97, 660 (1955); 80, 440 (1950).
4. T. D. Lee, F. Low, D. Pines, Phys. Rev., 90, 297 (1953).
5. А. С. Бруев, Препринт ФИАН № 46; М., I98I; Краткие сообщения по физике ФИАН № 4, I2 (I982).
6. P. Sheng, J. D. Dow, Phys. Rev., B4, 1343 (1971).