

П Р И Л О Ж Е Н И Е

Теория возмущений и электронный газ

В гл. 6 было установлено, что выражение (6.4) для кулоновской энергии двух электронов, полученное во втором порядке, расходится при малых значениях переносимого импульса \mathbf{q} . В настоящем приложении мы рассмотрим этот вопрос более подробно и обсудим предложенный Бракнером метод суммирования рядов в теории возмущений в предельном случае высокой плотности. Сначала покажем, что при суммировании членов энергии $\varepsilon_{ij}^{(2)}$ во втором порядке по всем парам электронов ij ферми-фона расходимость становится более слабой, но не исчезает. Мы суммируем только по незанятым виртуальным состояниям. Выполняемый здесь расчет относится только к членам прямого кулоновского взаимодействия пар электронов с антипараллельными спинами. Для простоты мы далее уже не будем говорить о спинах. Искомая сумма, с учетом множителя $1/2$ (чтобы не считать одинаковые члены дважды), имеет вид

$$E_2 = m \sum_{k_1, k_2 < k_F} \sum_{k_3, k_4 > k_F} \frac{\langle 12 | V | 34 \rangle \langle 34 | V | 12 \rangle}{k_1^2 + k_2^2 - k_3^2 - k_4^2} =$$

$$= -m \left(\frac{4\pi e^2}{\Omega} \right)^2 \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right)^3 \int d^3q \int d^3k_1 \int d^3k_2 \frac{1}{2q^4 [q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)]}. \quad (\text{П.1})$$

Пределы в интегралах (П.1) задаются следующими условиями:

$$k_1, k_2 < k_F; \quad |\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}| > k_F; \quad |\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}| > k_F.$$

Применение теории возмущений к проблеме многих тел ясно показывает, что, согласно представлениям вторичного квантования, при подсчете всех промежуточных состояний занятые состояния должны быть исключены. Положим, далее,

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}_1 = -q k_1 \xi_1, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}_2 = q k_2 \xi_2; \quad (\text{П.2})$$

тем самым пределы интегрирования задаются условием положительности ξ_1 и ξ_2 . Нас интересует поведение подынтегрального выражения при малых q , поскольку мы хотим здесь выяснить

вопрос о расходимости. Итак, имеем

$$k_F^2 < k_1^2 + q^2 - 2\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{q} = k_1^2 + q^2 + 2qk_1\xi_1 \quad (\text{П.3})$$

и, следовательно, для малых q

$$2qk_1\xi_1 > (k_F - k_1)(k_F + k_1) \approx 2k_F(k_F - k_1) \quad (\text{П.4})$$

или

$$k_F > k_1 > k_F - q\xi_1. \quad (\text{П.5})$$

Аналогичное условие получаем и для ξ_2 . Эти условия, справедливые для малых значений q , мы используем для определения пределов интегрирования по k_1 и k_2 .

При вычислении части (П.1), соответствующей малым значениям q , учтем, что ξ_1 и ξ_2 положительны. Теперь будем вычислять интеграл

$$\begin{aligned} & \int d^3k_1 \int d^3k_2 \frac{1}{q^4 [q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)]} = \\ & = (2\pi)^2 \int_0^1 d\xi_1 \int_0^1 d\xi_2 \int_{k_F - q\xi_1}^{k_F} k_1^2 dk_1 \int_{k_F - q\xi_2}^{k_F} k_2^2 dk_2 \frac{1}{q^4 (q^2 + qk_1\xi_1 + qk_2\xi_2)} \approx \\ & \approx \frac{(2\pi)^2}{q^4} k_F^4 \int_0^1 d\xi_1 \int_0^1 d\xi_2 \int_{k_F - q\xi_1}^{k_F} dk_1 \int_{k_F - q\xi_2}^{k_F} dk_2 \frac{1}{qk_F\xi_1 + qk_F\xi_2} = \\ & = \frac{(2\pi)^2}{q^3} k_F^3 \int_0^1 d\xi_1 \int_0^1 d\xi_2 \frac{\xi_1\xi_2}{\xi_1 + \xi_2}. \quad (\text{П.6}) \end{aligned}$$

Интегралы по ξ_1 и ξ_2 — это определенные интегралы, и, следовательно, интеграл по d^3q в (П.1) при малых q сводится к интегралу $\int q^{-1} dq$, который логарифмически расходится. Отсюда вытекает, что уже во втором порядке расчеты по теории возмущений становятся непригодными. Теперь мы покажем, что при проведении расчета по теории возмущений до бесконечно высокого порядка становится возможным просуммировать важнейшие вклады и получить нерасходящийся результат.

Метод Бракнера¹⁾. Для членов разложения в теории возмущений Рэля — Шредингера нам понадобятся сокращенные обозначения. Пусть $H = H_0 + V$, где V — потенциал кулоновского

¹⁾ Метод Бракнера весьма подробно изложен в его статье в сборнике [1].

взаимодействия, т. е.

$$V = \frac{1}{2} \sum_{lm} V_{lm}. \quad (\text{П.7})$$

Здесь суммирование ведется по всем парам электронов (без учета спина). Положим, что

$$\frac{1}{b} \equiv \frac{1 - P_0}{E_0 - H_0}, \quad (\text{П.8})$$

где P_0 — проекционный оператор, который записан в виде $1 - P_0$, чтобы исключить (при суммировании по промежуточным состояниям) члены исходного состояния, которым приписывается здесь индекс нуль.

Для иллюстрации использования введенных обозначений рассмотрим сначала невозбужденную систему, содержащую лишь два электрона в состояниях k_1 и k_2 . Энергия возмущения в первом порядке имеет вид

$$\varepsilon^{(1)} = \langle V \rangle = \langle 12 | V_{12} | 12 \rangle = \langle 12 | V | 12 \rangle, \quad (\text{П.9})$$

где для удобства индексы электронов у V опущены. Во втором порядке для энергии возмущения получим

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(2)} &= \left\langle V \frac{1}{b} V \right\rangle = \\ &= \sum_{\substack{1'2' \\ 1''2''}} \langle 12 | V | 1''2'' \rangle \left\langle 1''2'' \left| \frac{1 - P_{12}}{E_{12} - H_0} \right| 1'2' \right\rangle \langle 1'2' | V | 12 \rangle = \\ &= \sum_{1'2'}' \langle 12 | V | 1'2' \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{1'2'}} \langle 1'2' | V | 12 \rangle, \quad (\text{П.10}) \end{aligned}$$

т. е. выражение того же типа, что и (6.1). Здесь для обозначения промежуточных состояний мы использовали штрихи, чтобы сохранить цифры для индексов, когда позднее мы введем в рассмотрение большее количество электронов. Штрих у знака суммы означает, как и раньше, что при суммировании должны быть опущены члены, соответствующие состояниям $k_{1'} = k_1$ и $k_{2'} = k_2$.

Поправка к энергии в третьем порядке приводится в обычных учебниках; она равна

$$\varepsilon^{(3)} = \left\langle V \frac{1}{b} V \frac{1}{b} V \right\rangle - \left\langle V \frac{1}{b^2} V \right\rangle \langle V \rangle, \quad (\text{П.11})$$

где второй член в правой части обусловлен поправкой, появляющейся при нормировке волновой функции в первом порядке.

Первый же член в правой части (П.11) можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \langle V \frac{1}{b} V \frac{1}{b} V \rangle = \\ & = \sum_{\substack{34 \\ 56}} \langle 12 | V | 56 \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{56}} \langle 56 | V | 34 \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{34}} \langle 34 | V | 12 \rangle. \quad (\text{П.12}) \end{aligned}$$

Как мы увидим далее, этот член может описывать взаимодействие более чем двух электронов.

Сначала посмотрим, какой вид будет иметь (П.12) при наличии всего двух электронов в состояниях k_1 и k_2 . Каждый член, дающий вклад в (П.12), зависит от трех матричных элементов. В случае чисто кулоновского взаимодействия величина каждого матричного элемента полностью описывается величиной переносимого импульса q ; в матричном элементе $\langle 1'2' | V | 12 \rangle$ величина q определяется разностью $k_1 - k_{1'}$ или $k_2 - k_{2'}$. Члены наиболее общего вида в (П.12) для случая двух электронов будут содержать те же три матричных элемента, но в них будут входить различные значения переносимого импульса, например q, q', q'' ; однако полный импульс, переносимый от исходного (k_1) к конечному ($k_{1'}$) состоянию, должен равняться нулю. Иначе говоря, должно выполняться условие

$$(k_1 - k_{1'}) + (k_1' - k_{1''}) + (k_{1''} - k_1) = q + q' + q'' = 0, \quad (\text{П.13})$$

благодаря которому состояние $|12\rangle$ вновь перейдет в состояние $\langle 12|$ после того, как произойдут три процесса рассеяния, описываемые произведением матричных элементов

$$\langle 12 | V | 1''2'' \rangle \langle 1''2'' | V | 1' 2' \rangle \langle 1' 2' | V | 12 \rangle.$$

Структуру этого вклада в энергию, дающего поправку в третьем порядке, можно представить диаграммой, приведенной на рис. П.1. Для графического изображения членов в теории возмущений в виде диаграмм существует несколько способов. Диаграммы, приведенные в данном приложении, несколько отличаются от диаграмм Голдстоуна, которыми мы пользовались в гл. 6. Здесь все электроны изображаются сплошными

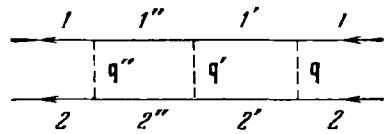


Рис. П.1. Диаграмма для поправки к энергии в третьем порядке в случае системы из двух электронов.

линиями, направленными на диаграмме справа налево; взаимодействия располагаются в той же последовательности, что и члены в (П.12), или в аналогичном разложении по теории возмущений. Взаимодействия изображаются пунктирными линиями; при них указывается переносимый при «столкновении»

импульс. Заметим, что сплошные линии в области «столкновения» не изогнуты, т. е. мы даже не пытаемся как-то изобразить углы рассеяния.

Когда система содержит более двух электронов, можно применять диаграммы других типов. Рассмотрим, например, случай трех электронов 1, 2, 3; тогда потенциал

$$V_{12} + V_{13} + V_{23} \quad (\text{П.14})$$

содержит три двухчастичных взаимодействия. Раскрытие в явном виде выражения $\langle V \frac{1}{b} V \frac{1}{b} V \rangle$ оказывается теперь более

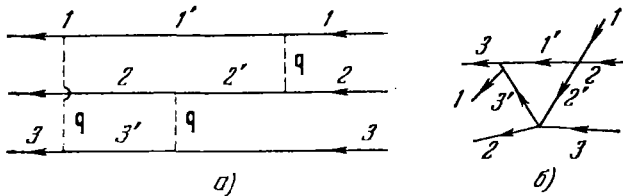


Рис. П.2. Диаграмма для поправки к энергии в третьем порядке в случае системы из трех электронов.

a — частный случай так называемой кольцевой диаграммы; она эквивалентна диаграмме *б*; *б* — та же диаграмма, изображенная несколько иначе, для того чтобы сделать более наглядной ее кольцевую структуру. В случае кольцевой диаграммы переносимые импульсы во всех вершинах должны быть одинаковы; иными словами, ни один электрон не должен возвращаться в свое исходное состояние.

сложным делом. На диаграмме рис. П.1 показаны два электрона в исходных состояниях 1 и 2; на диаграмме рис. П.2 показаны три электрона в исходных состояниях 1, 2, 3. Промежуточные состояния обозначены цифрами со штрихами 1', 2', 3'. Член энергии, соответствующий диаграмме, показанной на рис. П.2, имеет следующую структуру:

$$\langle 13 | V_{13} | 1'3' \rangle \frac{1}{E_{13} - E_{1'3'}} \langle 3'2 | V_{23} | 32' \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{1'2'}} \langle 1'2' | V_{12} | 12 \rangle. \quad (\text{П.15})$$

Этот член отвечает связанной диаграмме в том смысле, что ее нельзя разделить на две части так, чтобы между ними не проходили пунктирные линии взаимодействий. Рассматриваемая диаграмма относится к частному классу связанных диаграмм, называемых кольцевыми диаграммами.

Кольцевой диаграммой называется диаграмма, в которой в каждой вершине (кроме начальной и конечной) появляется одна новая частица, а одна имевшаяся там ранее частица покидает ее. В кольцевой диаграмме изменение импульса во всех вершинах одинаково.

Из самой схемы теории возмущений следует требование, чтобы все энергетические члены имели структуру, отвечающую возвращению частиц обратно в исходное состояние. В третьем порядке, кроме членов, соответствующих диаграммам на рис. П.1 и П.2, мы имеем члены вида

$$\langle 12 | V_{12} | 1'2' \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{1'2'}} \langle 32' | V_{23} | 32' \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{1'2'}} \langle 1'2' | V_{12} | 12 \rangle; \quad (\text{П.16})$$

пример соответствующей им диаграммы изображен на рис. П.3. В кулоновском взаимодействии член с $q=0$ равен нулю, и поэтому $\langle 32' | V_{23} | 32' \rangle = 0$; такой процесс не дает вклада в энергию.

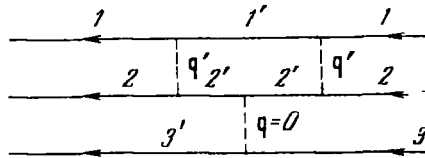


Рис. П.3. Диаграмма, иллюстрирующая рассеяние вперед на невозмущенной частице.

В случае взаимодействия более общего характера этот член будет вносить какой-то вклад; рассеяние частицы в состоянии $2'$ на частице в состоянии 3 описывается как *рассеяние вперед на невозмущенной частице* (если состояние 3 относится к числу состояний ферми-фона).

В третьем порядке имеются также члены следующей структуры:

$$\langle 12 | V | 1'2' \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{1'2'}} \langle 34 | V_{34} | 34 \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{1'2'}} \langle 1'2' | V_{12} | 12 \rangle. \quad (\text{П.17})$$

Эти члены отвечают взаимодействию четырех электронов; соответствующая диаграмма изображена на рис. П.4. Такая диаграмма называется несвязной, потому что ее можно разделить на две не зависящие друг от друга части. В случае кулоновского взаимодействия матричный элемент $\langle 34 | V_{34} | 34 \rangle$ исчезает, вклады от взаимодействия типа 12 исчезают по причине более общего характера. Дело в том, что второй член в правой части выражения (П.11) для энергии в третьем порядке, а именно $-\langle V \frac{1}{b^2} V \rangle \langle V \rangle$, точно компенсирует несвязный член (П.17).

и поэтому мы можем написать

$$\begin{aligned}
 & - \left\langle V \frac{1}{b^2} V \right\rangle \langle V \rangle = \\
 & = - \langle 12 | V_{12} | 1'2' \rangle \frac{1}{E_{12} - E_{1'2'}} \langle 1'2' | V_{12} | 12 \rangle \langle 34 | V_{34} | 23 \rangle. \quad (\text{П.18})
 \end{aligned}$$

Голдстоун доказал общую теорему о том, что *компенсация несвязных диаграмм в любом порядке всегда является точной*. Доказательство этой теоремы приведено в гл. 6.

Таким образом, в наших расчетах мы можем ограничиться только связными диаграммами. Теперь следует ввести еще одно

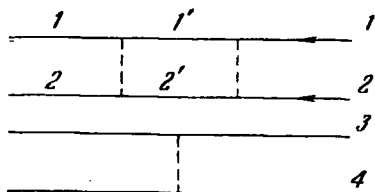


Рис. П.4. Несвязная диаграмма.

Части 3, 4 не связаны линиями взаимодействия с частями 1, 2.

упрощающее расчет приближение в решении задачи об электронном газе, а именно считать, что мы имеем дело со случаем высокой плотности (случай $r_s < 1$). При больших плотностях кольцевые диаграммы оказываются доминирующими. В данном случае при малых q во всех порядках снова имеются расходимости (что было явно показано для рассмотренных выше поправок к энергии во втором порядке, соответствующих кольцевым диаграммам). Однако здесь появляется и новое весьма важное обстоятельство — кольцевые диаграммы можно просуммировать во всех порядках и получить *сходящуюся* сумму даже при малых q . Выполнив суммирование, мы получим энергию корреляции для предельного случая высокой плотности. Заметим, что кинетическая энергия (энергия Ферми) доминирует при $r_s \rightarrow 0$, поскольку при увеличении плотности она возрастает быстрее, чем кулоновская энергия.

Причины, по которым при высокой плотности оказываются доминирующими кольцевые диаграммы, можно понять из рассмотрения следующего примера. Для системы N электронов в объеме Ω сопоставим все члены третьего порядка со структурой, соответствующей диаграммам на рис. П.1, с членами, соответствующими кольцевым диаграммам на рис. П.2, с точки зрения их зависимости от плотности. Согласно диаграмме на рис. П.2 «падающая» частица может быть выбрана одним из N^3 способов; число возможностей выбора q пропорционально Ω . Диаграмма на рис. П.1 дает N^2 способов выбора «падающей» частицы, но выбор q и q' производится независимо, и поэтому для q, q' мы имеем Ω^2 способов выбора. Следовательно, отношение числа членов последнего типа (рис. П.1) к числу членов

первого типа (рис. П.2) равно $(\Omega/N) \sim r_s^3$, откуда вытекает, что при $r_s \rightarrow 0$ будут преобладать члены, соответствующие кольцевым диаграммам.

В третьем порядке для вклада кольцевых диаграмм в энергию корреляции ферми-газа получим, используя (П.15), выражение

$$\sum_{1,2,3 < k_F} \sum_{1',2',3' > k_F} 2m^2 \frac{\langle 13 | V | 1'3' \rangle \langle 3'2 | V | 32' \rangle \langle 1'2' | V | 12 \rangle}{(k_1^2 + k_3^2 - k_1'^2 - k_3'^2)(k_1^2 + k_2^2 - k_1'^2 - k_2'^2)}, \quad (\text{П.19})$$

умноженное на число возможных последовательностей или эквивалентных диаграмм, равное в третьем порядке двум. Итак,

$$E_3 = 4m^2 \left(\frac{4\pi e^2}{\Omega} \right)^3 \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right)^4 \int d^3q \int d^3q_1 \int d^3q_2 \int d^3k_3 \cdot \frac{1}{q^6} \times \\ \times \frac{1}{q^2 + q \cdot (k_2 - k_1)} \cdot \frac{1}{q^2 + q \cdot (k_3 - k_1)}, \quad (\text{П.20})$$

где $k_1 < k_F$ и $|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| > k_F$ (аналогичные условия справедливы и для k_2 и k_3). Следуя далее тем же путем, который привел нас к (П.6), придем для интеграла по \mathbf{q} в предельном случае малых q к выражению

$$E_3 \sim \int \frac{d^3q}{q^5} \sim \int \frac{dq}{q^3}; \quad (\text{П.21})$$

при малых q оно расходится квадратично.

Гелл-Манн и Бракнер [2] определили вид вкладов E_n кольцевых диаграмм в n -м порядке и показали, что эти вклады можно просуммировать до бесконечно высокого порядка. Мы не будем приводить здесь их расчеты, но все же изложим схематически путь рассуждений, чтобы показать, как суммирование бесконечного ряда расходящихся членов может дать сходящийся результат.

Будем считать, что вклад в энергию в n -м порядке E_n выражается расходящимся интегралом

$$E_n = \frac{(-1)^n r_s^{n-2}}{n} \int_0^\infty \frac{dq}{q^{2n-3}}, \quad (\text{П.22})$$

который правильно аппроксимирует важнейшие экспоненты. Тогда энергию корреляции E_c можно представить непосредственно

в виде суммы вкладов E_n во всех порядках

$$E_c = \sum_{n=2}^{\infty} E_n = \int_0^{\infty} dq \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n r_s^{n-2}}{n q^{2n-3}} = \\ = \frac{1}{r_s^2} \int_0^{\infty} dq q^3 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \left(\frac{r_s}{q^2}\right)^n, \quad (\text{П.23})$$

где

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \left(\frac{r_s}{q^2}\right)^n = \frac{r_s}{q^2} - \ln\left(1 + \frac{r_s}{q^2}\right). \quad (\text{П.24})$$

Интеграл $r_s \int dq q$ сходится на нижнем пределе; далее, интеграл

$$\int dq \cdot q^3 \cdot \ln\left(1 + \frac{r_s}{q^2}\right) = \int dq \cdot q^3 \cdot \ln(q^2 + r_s) - 2 \int dq \cdot q^3 \cdot \ln q \quad (\text{П.25})$$

состоит из двух частей, каждая из которых сходится при $q \rightarrow 0$ (напомним, что $\lim_{x \rightarrow 0} x^m \ln x = 0$ при $m > 0$).

Мы, таким образом, показали, что кольцевые диаграммы можно просуммировать, но нужно еще показать, что в каждом порядке они являются основными для кулоновского взаимодействия при $r_s \rightarrow 0$. Это действительно так, и по очень простой причине: каждая вершина вносит в кольцевую диаграмму вклад, пропорциональный $1/q^2$, так что в n -м порядке все вершины дадут вклад, пропорциональный $1/q^{2n}$. При малых q обусловленная этим обстоятельством расходимость сильнее, чем от других диаграмм того же порядка, поскольку не существует некольцевых диаграмм, дающих такой множитель в каждой вершине. Следовательно, диаграмма на рис. П.1 дает вклад в подынтегральную функцию для $\epsilon^{(3)}$ вида

$$\frac{1}{q^2} \cdot \frac{1}{q'^2} \cdot \frac{1}{(q+q')^2};$$

эта величина при $q \rightarrow 0$ (независимо от q') стремится к бесконечности как q^{-2} . В случае кольцевой диаграммы соответствующий вклад пропорционален $1/q^6$. Детальный анализ всех остальных интегралов (включая и обменные) показывает, что r_s появляется в качестве множителя во вкладах всех диаграмм, за исключением кольцевых, и поэтому последние доминируют при $r_s \rightarrow 0$.

Энергия корреляции содержит также вклады, обусловленные обменом. Когда вместо прямого взаимодействия появляется обменное, множитель $1/q^2$ заменяется на

$$\frac{1}{(q + k_1 - k_2)^2};$$

эта величина при $q \rightarrow 0$ уже не дает расходимости. То, что замена будет именно такой, видно из сравнения матричного элемента для прямого взаимодействия

$$\langle 1'2' | V | 12 \rangle = \frac{1}{\Omega^2} \int d^3x d^3y V(x-y) \exp[-iq \cdot (x-y)] \sim \frac{1}{q^2} \quad (\text{П.26})$$

с матричным элементом для обменного взаимодействия

$$\begin{aligned} \langle 2'1' | V | 12 \rangle &= \frac{1}{\Omega^2} \int d^3x d^3y \exp[-i(k_2 - q) \cdot x] \times \\ &\quad \times \exp[-i(k_1 + q) \cdot y] V(x-y) e^{ik_1 \cdot x} e^{ik_2 \cdot y} = \\ &= \frac{1}{\Omega^2} \int d^3x d^3y V(x-y) \exp[i(k_1 - k_2 + q) \cdot (x-y)] \sim \frac{1}{(q + k_1 - k_2)^2}. \end{aligned} \quad (\text{П.27})$$

Литература

1. Brueckner K. A., в сб. «Many Body Problems», ed. by C. DeWitt, а. о., N. Y., 1959.
2. Gell-Mann M., Brueckner K. A., Phys. Rev. 106, 364 (1957).