Методы КТП в задачах нанофизики: спектральный анализ, техника теплового ядра, функциональное интегрирование

В.В. Нестеренко

Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
ОИЯИ, Дубна

VII Зимняя школа по теоретической физике
«Введение в теорию наноструктур»
Дубна, январь 25 - февраль 5, 2009

<u>Основная задача:</u>

расчет сил Ван дер Ваальса (молекулярных, флуктуационных) между макроскопическими телами

ПЛАН

1. **Физическая природа сил В-д-В: простой пример их расчета для двух линейных осцилляторов.**
2. **Основные идеи использования КТП в теории конденсированного состояния.**
3. **Расчет эффекта Казимира для идеально проводящих пластин.**
4. **Формула Лифщица (вывод).**
5. **Вакуумные эффекты для границ с более сложной геометрией.**
6. **Проблема расходимостей в казимировских расчетах.**
7. **Техника теплового ядра и спектральные дзета-функции.**
8. **Вакуумные эффекты при ненулевой температуре, высокотемпературная асимптотика термодинамических функций.**
9. **Модель плазменной оболочки (грубая модель графена).**

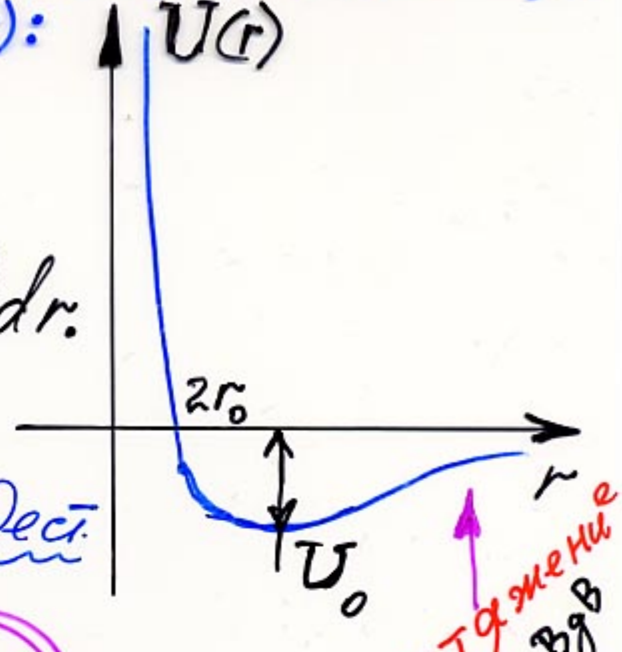
Физическая природа сил В-д-В

Уравнение В-д-В, описывающее состояние неидеального газа (интерполяционная ф-ла, неединственная):

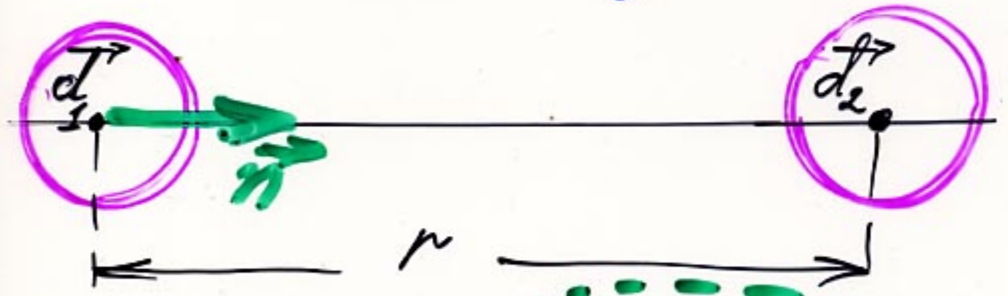
$$\left(P+\frac{N^2 a}{V^2}\right)(V-Nb)=NT,$$

$$b\simeq 4\vartheta_{mol}, \quad a=\pi\int_{2r_0}^{\infty}|U(r)|\,r^2\,dr.$$

$$\vartheta_{mol}=\frac{4}{3}\pi r_0^3$$



Энергия э-м взаимодейст.



$$V^{кл}(r)=\frac{q_1 q_2}{r}+(\text{дип-дип})\frac{1}{r^3}+(\text{дип-квад.})\frac{1}{r^4}+(\text{квад.-квад., дип-окт})\frac{1}{r^5}\ldots$$

$$q_1=q_2=0$$

$$V^{дип}(r)=\frac{-\vec d_1\vec d_2+3(\vec d_1\vec n)(\vec d_2\vec n)}{r^3}$$

$$\langle\psi_0|\hat V^{дип}(r)|\psi_0\rangle=0$$

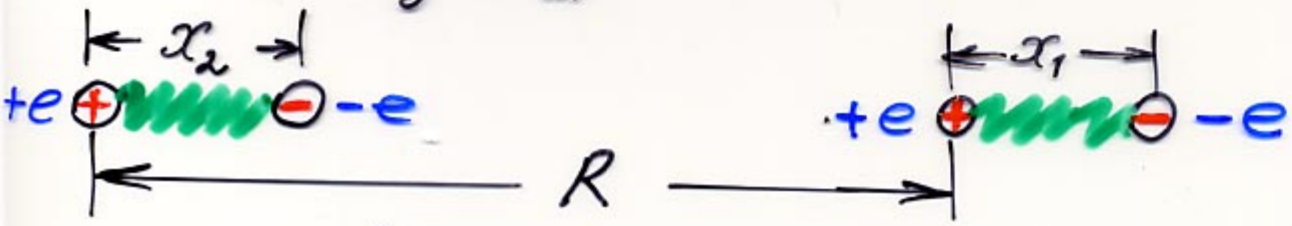
$$H=H_0+V(r), \quad E_n^{(1)}=V_{nn}=\langle n|V^{дип}|n\rangle=0$$

$$E_n^{(2)}=\sum_m{}'\frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\sim\frac{1}{r^6}$$ (F. London, 1928)

Модель двух осцилляторов

$$H_0 = \frac{1}{2m}p_1^2 + \frac{1}{2}\beta x_1^2 + \frac{1}{2m}p_2^2 + \frac{1}{2}\beta x_2^2$$

$$\omega_0^2 \doteq \frac{\beta}{m}$$



$$H_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R+x_1-x_2} - \frac{e^2}{R+x_1} - \frac{e^2}{R-x_2}$$

Пусть $|x_1|, |x_2| \ll R$, тогда

$$H_1 \approx -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$

$$\frac{1}{R+\alpha} = \frac{1}{R\left(1+\frac{\alpha}{R}\right)} = \frac{1}{R}\left(1+\frac{\alpha}{R}\right)^{-1} = \frac{1}{R}\left(1 - \frac{\alpha}{R} + \frac{\alpha^2}{R^2} - \dots\right)$$

Полный гамильтониан $H_0 + H_1$ в этом приближении диагонализуется подстановкой (канонич. преобразованием):

$$x_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad x_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$$

$$p_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 + p_2), \quad p_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 - p_2)$$

$$H = \frac{1}{2m}p_s^2 + \frac{1}{2}\left(\beta - \frac{2e^2}{R^3}\right)x_s^2 + \frac{1}{2m}p_a^2 + \frac{1}{2}\left(\beta + \frac{2e^2}{R^3}\right)x_a^2$$

$$\Delta U = \frac{\hbar}{2}(\Delta\omega_s + \Delta\omega_a) = -\hbar\omega_0 \cdot \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{\beta R^3}\right)^2$$

Сдвиг энергии нулевых колеб.

Потенциал Ленарда-Джонса

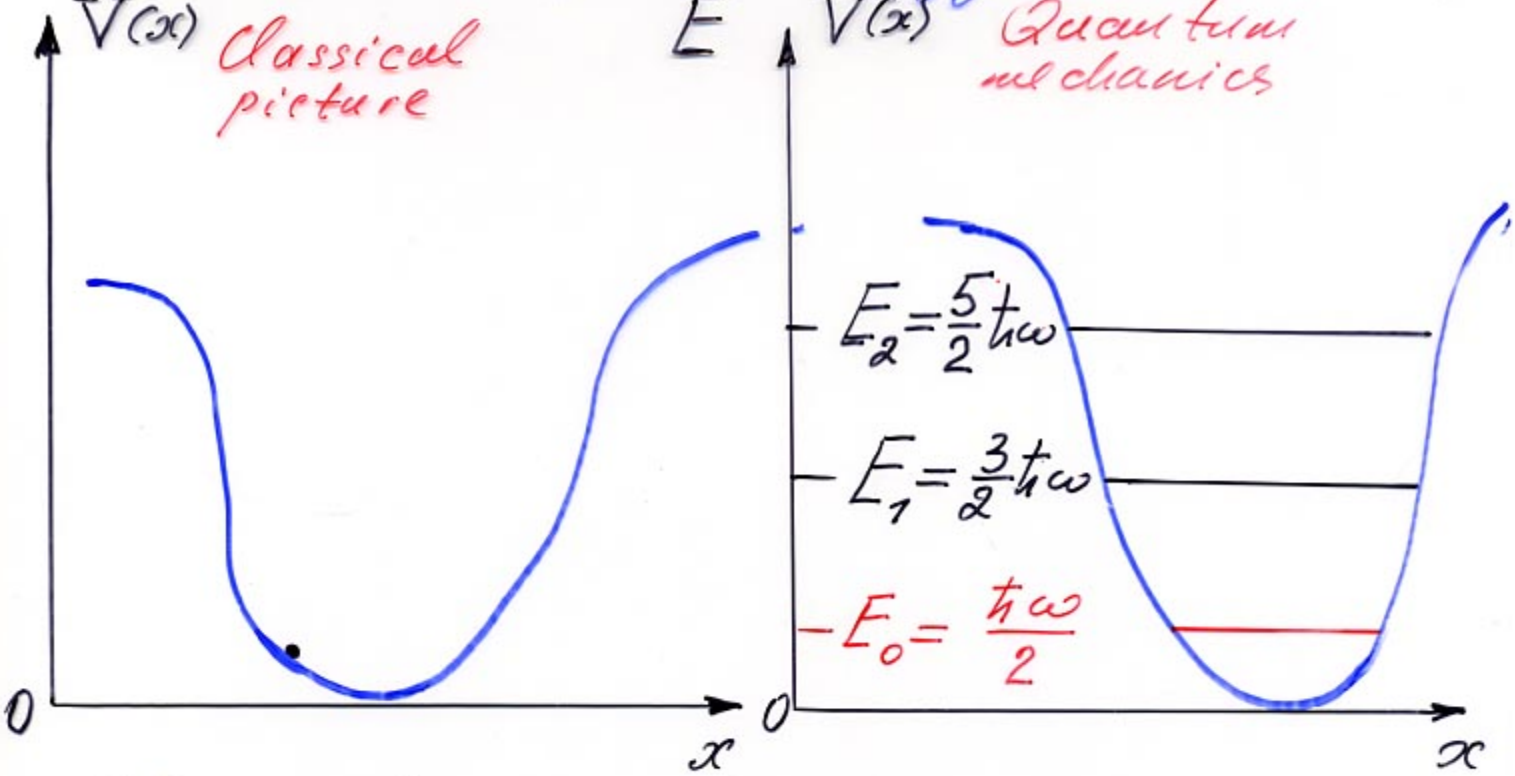
$$U(R) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]$$

Учёт запаздывания (Казимир, Полдер 1948)

$$U(R) = -\frac{23\hbar c}{4\pi R^7}\alpha_1(0)\alpha_2(0),$$

α_i – поляризуемости.

Lecture 1. Zero point energy in QM



E is a continuous quantity

$0 \leq E < \infty$

E is a discrete quantity

$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), n = 0, 1, 2, \ldots$

$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{\omega^2}{2}\hat{q}^2; \quad [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar, \quad \hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dq} \tag{1.1}$$

$$\hat{q} = q.$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\underbrace{\frac{\hat{p} + i\omega q}{\sqrt{2\omega\hbar}}}_{a^+} \cdot \underbrace{\frac{\hat{p} - i\omega q}{\sqrt{2\omega\hbar}}}_{a} + \underbrace{\frac{\hat{p} - i\omega q}{\sqrt{2\omega\hbar}}}_{a} \underbrace{\frac{\hat{p} + i\omega q}{\sqrt{2\omega\hbar}}}_{a^+}\right), \tag{1.2}$$

$$[a, a^+] \equiv a a^+ - a^+ a = 1, \quad 2 \tag{1.3}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(a^+ a + a a^+) = \frac{\hbar\omega}{2}(a^+ a + 1) \tag{1.4}$$

$$|n\rangle = (a^+)^n |0\rangle, \quad a|0\rangle = 0 \tag{1.5}$$

$$\hat{H}|0\rangle \equiv E_0 |0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} |0\rangle \tag{1.6}$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{1.7}$$

Differential equation

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\omega^2}{2}x^2\right)\psi_0(x) = E_0\,\psi_0(x) \quad (\hbar = 1) \tag{1.8}$$

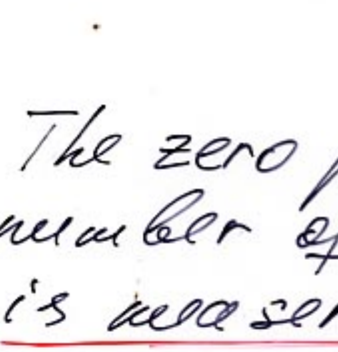
$$\psi(x) = e^{-ax^2}\varphi(x)$$

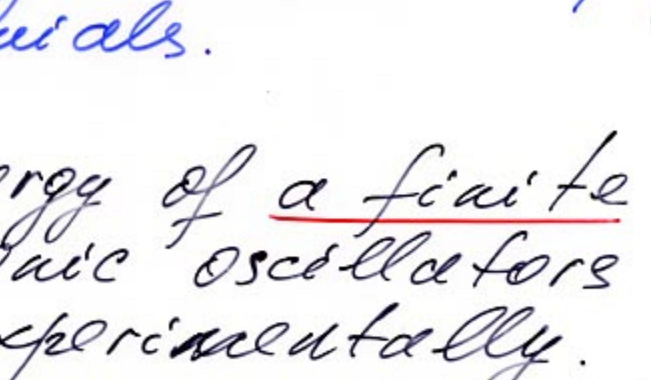
Problem 1.1. i) Check eqs. (1.2)–(1.7)
ii) By direct solving Eq. (1.8) find E_0 without addressing the Hermitean polynomials.

The zero point energy of a finite number of harmonic oscillators is measerable experimentally.

(neutron scattering on crystals at low temperature $\langle(\Delta x)^2\rangle_0 \neq 0$ X-ray Diffract (Debye, 1914)

specific heat C_V of solid body (crystal)





(Einstein and Stern, 1913)

Ground state energy in quantum field theory

(oscillator formalism)

Scalar field $\varphi(t,\vec{x})$ (noninteracting)

Klein-Gordon equation

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2)\varphi(t,\vec{x}) = 0, \quad \partial_\mu \partial^\mu \equiv \Box$$

Canonical formalism

$$\mathcal{L}(\varphi, \partial\varphi) = \frac{1}{2}(\partial\varphi)^2 - \frac{m^2}{2}\varphi^2,$$

$$\pi(t,\vec{x}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}(t,\vec{x})} = \dot{\varphi}(t,\vec{x}) \equiv \frac{\partial}{\partial t}\varphi(t,\vec{x})$$

$$H = \int d^3\vec{x}\,(\dot{\varphi}\pi - \mathcal{L}) = \int d^3\vec{x}\,[\pi^2 + (\vec{\nabla}\varphi)^2 + m^2\varphi^2]$$

The Fock representation

$$\varphi(t,\vec{x}) = \int d^3\vec{k}\,[f_{\vec{k}}(t,\vec{x})\,a^+(\vec{k}) + f^*_{\vec{k}}(t,\vec{x})\,a(\vec{k})]$$

$$(\Box + m^2) f_{\vec{k}}(t,\vec{x}) = 0, \quad (\Box + m^2) f^*_{\vec{k}}(t,\vec{x}) = 0$$

$$H = \int d^3\vec{k}\,\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2}\,[a^+(\vec{k})a(\vec{k}) + a(\vec{k})a^+(\vec{k})] =$$

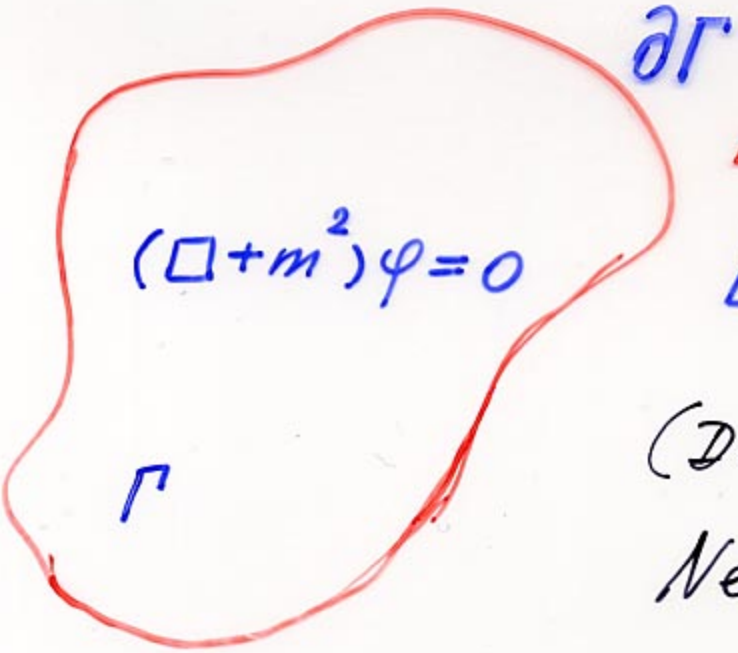
$$= \int d^3\vec{k}\,\hbar\omega(\vec{k}) : a^+(\vec{k})a(\vec{k}) : + \underbrace{\int d^3\vec{k}\,\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2}}_{\text{Casimir energy}}$$

$$\omega(\vec{k}) = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$$

$$[a(\vec{k}), a^+(\vec{k}')] = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}').$$

$E_c \to \infty$

Quantum field theory under the influence of the boundary conditions



Boundary conditions

$$\hat{B}\varphi\Big|_{\partial\Gamma} = 0$$

(Dirichlet $\varphi\big|_{\partial\Gamma} = 0$
Neumann $\partial\varphi\big|_{\partial\Gamma} = 0$
and so on)

Quantization

$$\varphi(t,\vec{x}) = \int d^3\vec{k}\,\Big[f_{\vec{k}}(\partial\Gamma, t, \vec{x})\, a^{+}(\vec{k}) + f^{*}_{\vec{k}}(\partial\Gamma, t, \vec{x})\, a(\vec{k}) \Big]$$

$$(\Box + m^2) f_{\vec{k}}(\partial\Gamma, t, \vec{x}) = 0 \qquad (\Box + m^2) f^{*}_{\vec{k}}(\partial\Gamma, t, \vec{x}) = 0$$

Boundary conditions

$$\hat{B} f_{\vec{k}}(\partial\Gamma, t, \vec{x})\Big|_{\partial\Gamma} = 0$$

The Fock operators are introduced for given boundary conditions!

$$H = \int d^3\vec{k}\ \hbar\omega(\vec{k}) : a^+(\vec{k}) a(\vec{k}) +$$

$$+ \underbrace{\int d^3\vec{k}\ \frac{\hbar\omega(k)}{2}}_{= E_c(\partial\Gamma)} ; \quad \omega(\vec{k}) \equiv \omega(\partial\Gamma, \vec{k})$$

Definition of the physical (observable) vacume energy

$$E_c^{phys}(\partial\Gamma) = E_c(\partial\Gamma) - E_c(\partial\Gamma_0)$$

Subtraction or renormalization of the vacum energy

Correct mathematical treatment requires regularization:

i) Cutoff (sharp or smooth)

ii) Dzeta regularization