

ДОКЛАДЫ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

1989

ТОМ 309 № 2

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

© А.Л. КУЗЕМСКИЙ

МЕТОД НЕПРИВОДИМЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В ТЕОРИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

(Представлено академиком Н.Н. Боголюбовым 6 IX 1988)

Опережающие и запаздывающие двухвременные температурные функции Грина (ФГ) в статистической механике квантовых систем были введены Н.Н. Боголюбовым и С.В. Тябликовым [1]. В отличие от причинных ФГ, они могут быть продолжены в комплексную плоскость. Эти удобные аналитические свойства способствовали тому, что метод двухвременных температурных ФГ получил широкое распространение в статистической механике [2–4]. Для нахождения запаздывающих и опережающих ФГ используют систему зацепляющихся уравнений вместе с соответствующими спектральными представлениями. Как указано в [1–3], при рассмотрении этой системы уравнений основной проблемой является разработка приемов эффективного расщепления системы уравнений с целью получения замкнутых уравнений для определения ФГ. То, что такое приближение должно выбираться весьма индивидуально, в зависимости от характера задачи [1], иногда критикуют в работах, использующих причинные ФГ и диаграммную технику, за несистематичность. Однако при диаграммном подходе также имеет место неоднозначность при получении требуемого приближения, и решение вопроса о том, какие диаграммы надо просуммировать, очевидно только для небольшого круга относительно простых задач.

В настоящей работе мы покажем, что для широкого круга разных задач статистической механики и теории конденсированных сред можно наметить достаточно систематический способ построения приближенных решений в рамках метода неприводимых ФГ [4–15]. В нашем подходе мы обсудим с единой точки зрения основные принципиальные вопросы, возникающие при построении приближенных решений в рамках метода неприводимых ФГ. Мы будем иметь дело с ФГ вида

$$(1) \quad G^r(t, t') = \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle = -i\theta(t - t') \langle [A(t)B(t')]_{\eta} \rangle, \quad \eta = \pm.$$

В работе [1] отмечено, что получающаяся цепочка уравнений для (1) одинакова не только для запаздывающих и опережающих, но и для причинных ФГ. Метод неприводимых ФГ [4–7] является полезной переформулировкой обычного метода уравнений движения Боголюбова–Тябликова. Конструктивная идея состояла в том, что при расчете одночастичных характеристик системы удобно сначала представить ФГ (1) в виде формального решения уравнения Дайсона с тем, чтобы производить необходимые расщепления многочастичных корреляционных функций в массовом операторе, поскольку при этом можно условно проконтролировать процедуру расщепления по аналогии с диаграммным подходом. Метод неприводимых ФГ [4–15] находится в тесной связи с методом проектирования Мори–Цванцига [8], который по существу является следствием идеи Н.Н. Боголюбова о “сокращенном описании” системы [2, 3]. В этом подходе бесконечная цепочка зацепляющихся уравнений для корреляционных функций сводится к нескольким относительно простым уравнениям, в которых “эффективно” учитывается та существенная информация о системе, которая определяет специфику данной задачи. Существенно подчеркнуть, что при использовании метода неприводимых ФГ структура получаемого решения существенно зависит от порядка уравнений для ФГ, в которых производится выделение неприводимых частей. Это, в свою очередь, определяет характер тех приближенных решений, которые мы строим на основе точного представления.

Для того чтобы пояснить сказанное выше, рассмотрим запаздывающую ФГ $G = \langle\langle A(t), A^+(t') \rangle\rangle$. В уравнение движения

$$(2) \quad \omega G(\omega) = \langle[A, A^+]_+\rangle + \langle\langle[A, H]_- | A^+\rangle\rangle$$

введем по определению неприводимую (ir) ФГ

$$(3) \quad \text{ir}\langle\langle[A, H]_- | A^+\rangle\rangle_\omega = \langle\langle[A, H]_- - \alpha A | A^+\rangle\rangle_\omega,$$

где величина α определяется из условия

$$(4) \quad \langle\langle[A, H]_-^{\text{ir}}, A^+\rangle\rangle \equiv 0.$$

Из уравнения (4) найдем

$$(5) \quad \alpha = \langle\langle[A, H]_- | A^+\rangle\rangle (\langle\langle[A, A^+]_+\rangle\rangle)^{-1} = M_1(M_0)^{-1}.$$

Здесь M_0, M_1 — нулевой и первый моменты спектральной плотности [2, 3]. Неприводимой называется такая ФГ, которая не может быть сведена путем расщепления к ФГ более низкого порядка. В статистической физике хорошо известны неприводимые корреляционные функции; в диаграммной технике неприводимые вершины являются совокупностью графиков, неразрезаемых по одной линии. Определение (3) переводит эти понятия на язык запаздывающих и опережающих функций Грина. Все ренормировки среднего поля, которые отделяются с помощью (3), относим к ФГ в обобщенном приближении среднего поля (ОПСР)

$$(6) \quad G^0 = \langle\langle[A, A^+]_+\rangle\rangle (\omega - \alpha)^{-1}.$$

Для расчета ФГ (3) используем прием дифференцирования по второму времени t' [5]. В полученном уравнении выделяем неприводимую часть по аналогии с (3). В результате найдем

$$(7) \quad G(\omega) = G^0(\omega) + G^0(\omega)P(\omega)G^0(\omega).$$

Здесь введен оператор рассеяния

$$(8) \quad P = (M_0)^{-1} \text{ir}\langle\langle[A, H]_- | ([A, H]_-)^*\rangle\rangle^{\text{ir}}(M_0)^{-1}.$$

Структура уравнения (7) позволяет в полной аналогии с диаграммной техникой определить массовый оператор M :

$$(9) \quad P = M + MG^0P.$$

В результате получим точное уравнение Дайсона (никаких расщеплений пока не сделано) для двухвременных температурных ФГ

$$(10) \quad G = G^0 + G^0MG; \quad M = (P)^P.$$

Массовый оператор M выражается, согласно (9), через "собственную" (в диаграммной технике — связанную) часть многочастичной неприводимой ФГ и описывает возможные процессы неупругого рассеяния, приводящие к затуханию и дополнительной перенормировке частоты самосогласованных квазичастичных возбуждений. Если говорить совершенно строго, определение (9) носит символический характер; подразумевается, что благодаря одинаковому виду уравнений для ФГ всех трех типов можно на каждом этапе вычислений перейти к причинным ФГ и подтвердить обоснованность определения (9). Поэтому следовало бы говорить об аналоге уравнения Дайсона. В дальнейшем эту оговорку будем опускать, поскольку это не приведет к недоразумению. Подчеркнем, что приведенный выше способ введения неприводимых ФГ является лишь общей схемой. Конкретный способ введения неприводимых частей (можно с равным правом говорить о неприводимых операторах) зависит от вида операторов A , типа гамильтониана и условий задачи. В [9–15] показана эффективность данного подхода для описания нормальных и сверхпроводящих

свойств систем с сильным спектром. Проиллюстрируем примера рассмотрим мо-

$$(11) \quad H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} +$$

который зависит от двух квантия электронов U . ные изменения типа по представляет случай оч вспомогательные операт

$$d_{i\alpha\sigma} = n_{i-\sigma}^\alpha a_{i\sigma}$$

представим одночастичн

$$G_{ij\sigma}(\omega) = \langle\langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma} \rangle\rangle$$

Далее, согласно (2)–(1) которого имеет вид

$$(12) \quad \bar{M}_{q\sigma}(\omega) = \bar{\Phi}^{-1} \{ \sum_{en}$$

В нашем подходе для (6)

$$(13) \quad G_{0\sigma}(q, \omega) \approx \frac{1}{\omega - \alpha}$$

Впервые в наиболее пол ваются следующими кор

$$(14) \quad W^\pm \sim \{ \langle a_{i-\sigma}^+ n_{i\sigma}^\pm \rangle + \langle n_{i-\sigma}^\pm n_{i-\sigma}^\pm \rangle +$$

Решение (13) более об

Решение "Хаббард I" е $\sim \langle n_{j-\sigma} n_{i-\sigma} \rangle \approx n_{-\sigma}^2$.

несводимость средних и нов в атомном пределе альную структуру, котс жений. Так, в теории св включать аномальные сп

$$(15) \quad \text{ir}\langle\langle a_{i\sigma} n_{i-\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle\rangle + \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} \rangle \langle\langle a_{i-\sigma}^+ \rangle\rangle$$

Определение (15) позво водимости в приближен разупорядоченных бина; ментальное положение с нитном поляроне. Расс проводника [13]. В отл ной ФГ с помощью ура

свойств систем с сильным взаимодействием и сложным характером электронного спектра. Проиллюстрируем сказанное некоторыми примерами. В качестве первого примера рассмотрим модель Хаббарда. Запишем для нее гамильтониан в виде

$$(11) \quad H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma},$$

который зависит от двух параметров: эффективной ширины зоны w и энергии отталкивания электронов U . С изменением их отношения в системе происходят радикальные изменения типа перехода металл-диэлектрик и т.п. Наибольшую трудность представляет случай очень сильной, но конечной корреляции электронов. Вводя вспомогательные операторы [9]

$$d_{i\alpha\sigma} = n_{i-\sigma}^\alpha a_{i\sigma} \quad (\alpha = \pm), \quad n_{i\sigma}^+ = n_{i\sigma}, \quad n_{i\sigma}^- = (1 - n_{i\sigma}),$$

представим одночастичную ФГ в виде

$$G_{ij\sigma}(\omega) = \langle\langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = \sum_{\alpha\beta} \langle\langle d_{i\alpha\sigma} | d_{j\beta\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = \sum_{\alpha\beta} G_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(\omega).$$

Далее, согласно (2)–(10), выводится точное уравнение Дайсона, массовый оператор которого имеет вид

$$(12) \quad \bar{M}_{q\sigma}(\omega) = \bar{\Phi}^{-1} \left\{ \sum_{em} t_{ie} t_{mj} \text{ir} \langle\langle \bar{D}_{ie} | \bar{D}_{mj}^+ \rangle\rangle_\omega \right\}_q \bar{\Phi}^{-1}.$$

В нашем подходе для (6) имеем нелокальное выражение уже в ОПСП:

$$(13) \quad G_{0\sigma}(q, \omega) \approx \frac{n_{-\sigma}}{\omega - E_- - n_{-\sigma} W_{q,-\sigma}^-} + \frac{(1 - n_{-\sigma})}{\omega - E_+ - (1 - n_{-\sigma}) W_{q,-\sigma}^+}.$$

Впервые в наиболее полном виде получен явный вид средних полей, которые описываются следующими корреляторами:

$$(14) \quad W^\pm \sim \{ \langle a_{i-\sigma}^+ n_{i\sigma}^\pm a_{j-\sigma} \rangle + \langle a_{i-\sigma} n_{i\sigma}^\mp a_{j-\sigma}^+ \rangle + \langle n_{j-\sigma}^\pm n_{i-\sigma}^\pm \rangle + \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{j-\sigma} a_{j\sigma}^+ \rangle - \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} a_{j-\sigma}^+ a_{j\sigma}^+ \rangle \}.$$

Решение (13) более общее, чем решение "Хаббард III" и решение методом Рот [9]. Решение "Хаббард I" есть частный случай (14), отвечающий приближению $W^\pm \sim \langle n_{j-\sigma} n_{i-\sigma} \rangle \approx n_{-\sigma}^2$. Интересно отметить, что в нашем подходе точно показана несводимость средних полей (14) к функционалам от средней плотности электронов в атомном пределе. Вообще говоря, средние поля могут иметь весьма нетривиальную структуру, которую трудно установить из каких-либо независимых соображений. Так, в теории сверхпроводимости Н.Н. Боголюбова [2] средние поля должны включать аномальные спаривания. Например, для модели (11) [10] имеем

$$(15) \quad \text{ir} \langle\langle a_{i\sigma} n_{i-\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle\rangle = \langle\langle a_{i\sigma} n_{i-\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle\rangle - \langle n_{i-\sigma} \rangle \langle\langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle\rangle + \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} \rangle \langle\langle a_{i-\sigma}^+ | a_{j\sigma}^+ \rangle\rangle.$$

Определение (15) позволило провести последовательный вывод уравнений сверхпроводимости в приближении сильной связи для переходных металлов [10, 11] и сильно разупорядоченных бинарных сплавов [12]. Чтобы яснее представить себе это фундаментальное положение о сложной структуре средних полей, исследуем задачу о магнитном поляроне. Рассмотрим обычную s - d -обменную модель магнитного полупроводника [13]. В отличие от режима рассеяния [13], при расчете одноэлектронной ФГ с помощью уравнений (2)–(10) учтем возможность образования связанно-

го магнитополярного состояния при конечных температурах [14]. Выражение для спектра магнитного полярона имеет вид

$$(16) \quad E_{k\sigma} = \epsilon_{k\sigma}^0 + I_{s-d}^2 N^{-1} \Psi_{k\sigma}(E_{k\sigma}),$$

$$\Psi_{k\sigma}(\omega) = \sum_q \left\{ \frac{\langle S_{-q}^{-\sigma} S_q^{\sigma} \rangle}{[1 - I\Lambda_{k\sigma}(\omega)](\omega + z_{\sigma} \omega_q - \epsilon_{k+q, -\sigma}^0)} + \frac{[1 + I\Lambda_{k\sigma}(\omega)] \langle (S_{-q}^z)^{ir} (S_q^z)^{ir} \rangle}{[1 - I\Lambda_{k\sigma}(\omega)](\omega - \epsilon_{k+q, \sigma}^0)} \right\}.$$

При нулевой температуре полученное решение сводится к классическому результату Шастри—Маттиса [14].

Развитый здесь подход тесно связан с фундаментальными идеями Н.Н. Боголюбова о нарушенной симметрии и квазисредних [2, 3]. По существу тот или иной способ введения средних полей должен соответствовать характеру нарушенной симметрии системы. Ярким примером этого является нерешенная проблема микроскопического описания антиферромагнетизма [15], для которой в рамках данного подхода удастся наметить путь построения последовательной теории. Кроме того, как видно из (12)–(16), развитый подход позволяет естественным образом вычислять спектры квазичастичных возбуждений и их затухание в случае, когда система имеет сложный многоветвевой спектр.

Объединенный институт ядерных исследований
Дубна Московской обл.

Поступило
21 IX 1988

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. — ДАН, т. 126, № 1, с. 53–56.
2. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н., мл. Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984. 384 с.
3. Боголюбов Н.Н., мл., Садовников Б.И. Некоторые вопросы статистической механики. М.: Высш. шк., 1975. 352 с.
4. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 527 с.
5. Церковников Ю.А. — ДАН, 1966. т. 169, № 5, с. 1064–1067.
6. Плакида Н.М. — ТМФ, 1970, т. 5, № 1, с. 147–153.
7. Plakida N.M. — Phys. Lett., vol. 43A, № 6, p. 481–482.
8. Церковников Ю.А. — ТМФ, 1981, т. 49, № 2, с. 219–233.
9. Куземский А.Л. — ТМФ, 1978, т. 36, № 2, с. 208–223.
10. Вуйичич Г.М., Куземский А.Л., Плакида Н.М. — ТМФ, 1982, т. 53, № 1, с. 138–145.
11. Kuzemsky A.L., Holas A., Plakida N.M. — Physica, 1983, vol. 122B, № 1, p. 168–182.
12. Wysokinski K.I., Kuzemsky A.L. — J. Low Temp. Phys., 1983, vol. 52, № 1/2, p. 81–98.
13. Marvakov D., Vlahov J., Kuzemsky A.L. — J. Phys. C: Solid Stat. Phys., 1985, vol. 18, № 10, p. 2871–2885.
14. Marvakov D., Kuzemsky A.L., Vlahov J. — Physica, 1986, vol. 138B, № 1, p. 129–140.
15. Marvakov D., Kuzemsky A.L. Preprint ICTP/87/234, Trieste, 1987.