

С326

Т-647

9/11-71

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 5895

3054/2-71



Б.С. Тош ич

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

К ТЕОРИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ
В СИСТЕМАХ С НЕСОХРАНЯЮЩИМСЯ
ЧИСЛОМ КВАЗИЧАСТИЦ

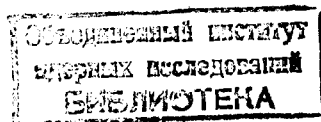
1971

P4 - 5895

Б.С. Тошич*

К ТЕОРИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ
В СИСТЕМАХ С НЕСОХРАНЯЮЩИМСЯ
ЧИСЛОМ КВАЗИЧАСТИЦ

* Постоянный адрес: Институт ядерных исследований им. Б.Кидрича,
Белград, Югославия.



1. Введение

В настоящей работе делается попытка построить теорию связанных состояний двух квазичастиц в системах, гамильтониан которых не коммутирует с оператором их полного числа. В отличие от систем, сохраняющих полное число квазичастиц, когда задача о связанных состояниях решается точно, здесь возникают математические трудности, из-за которых анализ связанных состояний можно провести лишь приближенно. Мы попытаемся строить теорию по степеням малого параметра. В качестве малого параметра выберем отношение ширины зоны возбуждений к энергии возбуждения изолированного атома. Характерным примером систем, в которых упомянутый параметр действительно мал, является система Френкелевских экситонов. Однако для большей наглядности расчётов проведем анализ связанных состояний в сегнетоэлектрике. Гамильтониан квазиспиновой модели сегнетоэлектрика проще, чем гамильтониан системы экситонов Френкеля, а кроме того, наложением достаточно сильного внешнего электрического поля на сегнетоэлектрик всегда можно добиться того, чтобы энергия возбуждения изолированного атома намного превышала ширину зоны. Связанные состояния проанализируем в линейном приближении по малому параметру. Как мы увидим в дальнейшем, более точный расчёт не составляет принципиальных трудностей, а лишь требует более громоздких расчётов.

2. Энергии и волновые функции связанных состояний в приближении ГЛГ

Проведем анализ связанных состояний в сегнетоэлектрике, используя приближение Гайтлера-Лондона-Гейзенберга (ГЛГ), т.е. пренебрегая эффектами несохранения квазичастиц. Насколько нам известно, расчёты подобного рода для сегнетоэлектрика не проводились, и результаты будут полезны для сравнения с результатами, которые даст учет несохранения.

Следуя работам^{1,2/}, гамильтониан квазиспиновой модели сегнетоэлектрика типа KH_2PO_4 запишем в виде:

$$H = -2\Omega \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^x - \sum'_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^x S_{\vec{m}}^x - 2 \sum'_{\vec{n}\vec{m}} C_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^z S_{\vec{m}}^z, \quad (2.1)$$

где Ω - частота туннелирования протона в потенциальной яме с двойным дном, $D_{\vec{n}\vec{m}}$ и $C_{\vec{n}\vec{m}}$ - симметричные и положительные коэффициенты и $S^{x,y,z}$ - компоненты оператора квазиспина в узле решетки \vec{n} . Ось x является осью квантования. В связи с возможностью существования двух позиций протона операторы $S^{x,y,z}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям для спина $S = 1/2$ и, следовательно, их можно представить через операторы Паули.

Предполагая для удобства, что сегнетоэлектрик обладает простой кубической структурой и используя приближение ближайших соседей, гамильтониан (2.1) перепишем в представлении Паули в следующем виде:

$$H = E_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}} - C \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}+\vec{\lambda}} + \frac{1}{2} C \sum_{\vec{n}\vec{\lambda}} (P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}+\vec{\lambda}} + P_{\vec{n}+\vec{\lambda}} P_{\vec{n}}) - D \sum_{\vec{n}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}+\vec{\lambda}} P_{\vec{n}+\vec{\lambda}} P_{\vec{n}}, \quad (2.2)$$

где: $E_0 = -\Omega N - \frac{1}{4} N \ell D$; $D = 2\Omega + 2 \ell D$, C и D - постоянные взаимодействия ближайших соседей, ℓ - размерность кристалла, N - число атомов в кристалле и $\vec{\lambda}$ - вектор, соединяющий ближайших соседей.

Операторы Паули $P_{\vec{n}}^{\dagger}$ и $P_{\vec{n}}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$[P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}^{\dagger}] = (1 - 2P_{\vec{n}}^{\dagger} P_{\vec{n}}) \delta_{\vec{n}, \vec{m}}; P_{\vec{n}}^{+2} = P_{\vec{n}}^2 = 0, \quad (2.3)$$

$$[P_{\vec{n}}^{\dagger}, P_{\vec{m}}^{\dagger}] = [P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = 0.$$

Как указывалось в^{/3/}, расчёт связанных состояний в представлении Паули требует наложения дополнительных условий на паулиевские волновые функции, т.е. задача не решается самосогласованным образом. Эти трудности были разрешены в работе^{/4/}, где для паули-операторов было использовано их точное бозонное представление^{/5/}, с помощью которого задачу удалось решить самосогласованным образом. Поэтому анализ связанных состояний будем проводить в бозонном представлении операторов Паули работы^{/5/}:

$$P_{\vec{n}} = \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_{\vec{n}}^{+\nu} B_{\vec{n}}^{\nu} \right]^{1/2} B_{\vec{n}}; P_{\vec{n}}^{\dagger} P_{\vec{n}}^{\dagger} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} B_{\vec{n}}^{+\nu+1} B_{\vec{n}}^{\nu+1}. \quad (2.4)$$

Кроме того, в гамильтониане (2.2) опустим слагаемое

$$\frac{1}{2} C \sum_{\vec{n}} \sum_{\vec{\lambda}} (P_{\vec{n}}^{\dagger} P_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{\dagger} + P_{\vec{n}}^{\dagger} P_{\vec{n}+\vec{\lambda}}), \quad (2.5)$$

которое приводит к несохранению числа квазичастиц. Тогда (см.^{/4/}) эффективный бозонный гамильтониан для анализа связанных состояний принимает следующий вид:

$$H_{\text{ГЛГ}} = H_{\text{ГЛГ}}^{(2)} + H_{\text{ГЛГ}}^{(4)}, \quad (2.6)$$

где:

$$H_{\text{ГЛГ}}^{(2)} = E_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}} - C \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}} \quad (2.7)$$

$$H_{\text{ГЛГ}}^{(4)} = -\Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{+2} B_{\vec{n}}^2 + C \sum_{\vec{n}} (B_{\vec{n}}^{+2} B_{\vec{n}}^2 B_{\vec{n}+\vec{\lambda}} + B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^2) - \quad (2.8)$$

$$- D \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}} B_{\vec{n}} .$$

Волновая функция системы с двумя элементарными возбуждениями имеет следующий вид:

$$|2\rangle = \sum_{\vec{f}, \vec{g}} A_{\vec{f}, \vec{g}} B_{\vec{f}}^+ B_{\vec{g}}^+ |0\rangle, \quad (2.9)$$

где коэффициенты $A_{\vec{f}, \vec{g}}$ симметричны и представляют собой амплитуду вероятности нахождения возбуждений в узлах \vec{f} и \vec{g} . Следуя [4], для определения коэффициентов $A_{\vec{f}, \vec{g}}$ получаем следующее уравнение:

$$\sum_{\vec{f}, \vec{g}} A_{\vec{f}, \vec{g}} \{ E + [B_{\vec{f}}^+ B_{\vec{g}}^+, H_{\text{ГЛГ}}] \} |0\rangle = 0, \quad (2.10)$$

где $E = E_2 - E_0$ — положительная величина, представляющая собой энергию возбуждения системы. Подставляя в (2.10) значение коммутатора $[B_{\vec{f}}^+ B_{\vec{g}}^+, H_{\text{ГЛГ}}]$, с учётом того, что все состояния $B_{\vec{f}}^+ B_{\vec{g}}^+ |0\rangle \neq 0$, уравнение (2.10) приведем к виду:

$$(E - 2\Delta) A_{\vec{f}, \vec{g}} + C \sum_{\vec{\lambda}} (A_{\vec{f}, \vec{g}+\vec{\lambda}} + A_{\vec{f}+\vec{\lambda}, \vec{g}}) = -2\Delta A_{\vec{f}, \vec{f}} \delta_{\vec{f}, \vec{g}} +$$

$$+ 2C \sum_{\vec{\lambda}} A_{\vec{f}, \vec{f} + \vec{\lambda}} \delta_{\vec{f}, \vec{g}} + 2C \sum_{\vec{\lambda}} A_{\vec{f}, \vec{f}} \delta_{\vec{f} + \vec{\lambda}, \vec{g}} - 2D \sum_{\vec{\lambda}} A_{\vec{f}, \vec{f} + \vec{\lambda}} \delta_{\vec{f} + \vec{\lambda}, \vec{g}}. \quad (2.11)$$

Переходя в (2.11) к фурье-образам коэффициентов $A_{\vec{f}, \vec{g}}$:

$$A_{\vec{f}, \vec{g}} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} a_{\vec{q}}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{R} + i\vec{q}'\vec{r}}, \quad (2.12)$$

где:

$$\vec{R} = \frac{\vec{f} + \vec{g}}{2}; \vec{r} = \vec{f} - \vec{g}; \quad a_{\vec{q}}(-\vec{q}) = a_{\vec{q}}(\vec{q}), \quad (2.13)$$

мы получили следующее интегральное уравнение Фредгольма с вырожденным ядром:

$$\begin{aligned} (E - 2\Delta + 4C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda}) a_{\vec{q}}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}'} \{ -2\Delta + 4C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}'\vec{\lambda} + \\ + 4C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda} - 4D \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{q}\vec{\lambda} \cos \vec{q}'\vec{\lambda} \} a_{\vec{q}}(\vec{q}'). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Приравнивая к нулю выражение, стоящее в скобках в левой стороне уравнения (2.14), мы получим сумму энергий двух свободных возбуждений:

$$E = E_{\vec{q}}(\vec{q}) = 2\Delta - 4C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda}. \quad (2.15)$$

Если $E \neq E_{\vec{q}}(\vec{q})$, уравнение (2.14) надо разделить на $E - E_{\vec{q}}(\vec{q})$ и тогда из условия нетривиальной разрешимости полученной таким образом системы алгебраических уравнений получим энергии связанных состояний. В одномерном случае (2.14) сводится к уравнению:

$$a_{\vec{q}}(\vec{q}) = \sum_{l=1}^2 \frac{\Phi_{\vec{q}}^{(l)}(\vec{q})}{\Phi_{\vec{q}}^{(0)}(\vec{q})} I_{l\vec{q}}, \quad (2.16)$$

где:

$$\Phi_Q^{(0)}(q) = E - E_Q(q) = \cos \frac{Q}{2} \cos q - \beta; \quad \Phi_Q^{(1)}(q) = \cos \frac{Q}{2} \cos q - \eta$$

$$\Phi_Q^{(2)}(q) = \cos \frac{Q}{2} - \tau \cos Q; \quad l_{lQ} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \alpha_Q(q) \cos^{l-1} q dq \quad (l=1,2) \quad (2.17)$$

$$\beta = \frac{2\Delta - E}{4C}; \quad \eta = \frac{\Delta}{2C}; \quad \tau = \frac{D}{C}.$$

Из условия нетривиальной разрешимости (2.16):

$$|\delta_{ll'} - L_{ll'}(Q)| = 0; \quad L_{ll'}(Q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\Phi_Q^{(l')}(q)}{\Phi_Q^{(l)}(q)} \cos^{l-1} q dq; \quad (2.18)$$

$$(l, l' = 1, 2)$$

мы получим энергии связанных состояний:

$$E_1(Q) = 0; \quad E_2(Q) = 2 \left| \Delta - D - \frac{C^2}{D} \cos^2 \frac{Q}{2} \right|. \quad (2.19)$$

Соответствующие волновые функции (в предположении, что связываются элементарные возбуждения на ближайших соседей) имеют следующий вид:

$$|2\rangle_{E=E_1(Q)} = \frac{1}{N\sqrt{2}} \sum_{fQ} e^{iQf} B_f^{+2} |0\rangle \quad (2.20)$$

$$|2\rangle_{E=E_2(Q)} = \frac{1}{N\sqrt{2}} \sum_{fQ} e^{iQf} \left(e^{i\frac{Q}{2}} B_f^+ B_{f+1}^+ + e^{-i\frac{Q}{2}} B_f^+ B_{f-1}^+ \right) |0\rangle. \quad (2.21)$$

Следовательно, мы пришли к выводу, что состояния (2.20) с двумя элементарными возбуждениями в одном узле ненаблюдаемы, поскольку им соответствует энергия $E_1(Q) = 0$. Наблюдаемые связанные состояния с энергией $E_2(Q)$ описываются волновой функцией (2.21), которая не содержит членов с двумя бозонами в одном узле. Можно показать, что при $C, D > 0$ энергия $E_2(Q)$ при всех значениях Q лежит ниже зоны свободных состояний $E_0(q)$ (2.15).

Аналогичный анализ можно провести и в случае двухмерной и трехмерной решеток. Предполагая, что $\cos \frac{Q_x}{2} = \cos \frac{Q_y}{2} = \mu_2$, для определения наблюдаемых связанных состояний в двухмерной решетке получим следующее уравнение:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(\mu_2 - \tau \cos x)(\cos x \pm \cos y)}{\mu_2 (\cos x + \cos y) - \beta} dx dy = (2\pi)^2. \quad (2.22)$$

В трехмерном кристалле при $\cos \frac{Q_x}{2} = \cos \frac{Q_y}{2} = \cos \frac{Q_z}{2} = \mu_3$ энергии связанных состояний определены соотношениями:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(\mu_3 - \tau \cos x)(\cos x + 2 \cos y)}{\mu_3 (\cos x + \cos y + \cos z) - \beta} dx dy dz = (2\pi)^3, \quad (2.23)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(\mu_3 - \tau \cos x)(\cos x - \cos y)}{\mu_3 (\cos x + \cos y + \cos z) - \beta} dx dy dz = (2\pi)^3, \quad (2.24)$$

причём уровень (2.24) дважды вырожден.

Следует отметить, что при $\tau = 1$ все формулы (2.18) и (2.22-2.24) совпадают с соответствующими формулами для спина $S = 1/2$ (см. (6)).

3. Связанные состояния с учётом несохранения квазичастиц

Перейдем теперь к нашей основной задаче - исследованию связанных состояний с учётом несохранения полного числа квазичастиц. Следовательно, анализ связанных состояний будем проводить, используя полный гамильтониан (2.2).

Прежде всего отметим, что расчёт связанных состояний нельзя проводить в решеточном пространстве, потому что в этом пространстве плохо определено вакуумное состояние системы. Действительно:

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle + \frac{1}{2} C \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} P_{\vec{n}}^+ P_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+ |0\rangle \neq E|0\rangle,$$

и нам необходимо перейти в импульсное пространство, в котором вакуумное состояние системы хорошо определено. Отсюда следует, что при исследовании нельзя использовать операторы Паули не только потому, что в паулиевском представлении задачу нельзя решать самосогласованным образом, но еще и потому, что ввиду неканоничности фурье-преобразований операторов $P_{\vec{n}}$ мы не знаем перестановочных соотношений (кинематику) их фурье-образов - операторов $P_{\vec{k}}$. Поэтому анализ будем проводить, используя бозонное представление (2.4) для операторов Паули. Кроме того, здесь будет удобнее использовать при расчётах метод функций Грина. Энергии связанных состояний будем находить, исследуя полюса двухчастичной функции Грина

$$G^{(2)}(\vec{\nu}, \vec{\mu}) = G^{(2)}(\vec{\mu}, \vec{\nu}) = \sum_{\vec{\mu}'} \gamma_{\vec{\mu}'} \langle\langle B_{\vec{\mu}+\vec{\nu}-\vec{\mu}'} B_{\vec{\mu}'} | B_{\vec{\nu}}^+ B_{\vec{\mu}}^+ \rangle\rangle, \quad (3.1)$$

где $\vec{\mu}, \vec{\mu}', \vec{\nu}$ - волновые векторы и $\gamma_{\vec{\mu}'}$ - коэффициенты, которые надо определить таким образом, чтобы все полюса функции $\sum_{\vec{\mu}'} \langle\langle B_{\vec{\mu}+\vec{\nu}-\vec{\mu}'} B_{\vec{\mu}'} | B_{\vec{\nu}}^+ B_{\vec{\mu}}^+ \rangle\rangle$ сохранились.

В начале мы рассмотрим энергетический спектр системы в нулевом приближении. Гамильтониан (2.2) запишем в бозонном представлении в следующем виде:

$$H = H^{(2)} + H^{(4)} + \sum_{l=3}^{\infty} H^{(2l)}, \quad (3.2)$$

где:

$$H^{(2)} = H^{(2)}_{\text{ГЛГ}} + \frac{1}{2} C \sum_{\vec{k}\vec{\lambda}} (B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+ + B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+ B_{\vec{n}}^+) \quad (3.3)$$

$$H^{(4)} = H^{(4)}_{\text{ГЛГ}} - \frac{1}{2} C \sum_{\vec{k}\vec{\lambda}} (B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+2} B_{\vec{n}}^+ + B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+2} + B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+ B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^2 + B_{\vec{n}}^+ B_{\vec{n}}^2 B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^+)$$

и третий член представляет собой сумму гамильтонианов восьмого и т.д. порядков по бозонным операторам. Как мы ниже увидим, для нахождения спектра в нулевом приближении в данном случае нужен и учёт членов четвертого порядка в гамильтониане.

Гамильтониан (3.3) диагонализуются методом u, v -преобразований Тябликова (см. /7/). В результате подстановки:

$$B_{\vec{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ e^{i\vec{k}\vec{n}}; \quad b_{\vec{k}}^+ = \frac{\sigma_{\vec{k}}^+ + R_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}}^+}{\sqrt{1 - R_{\vec{k}}^2}}, \quad (3.5)$$

где $b_{\vec{k}}^+$ и $\sigma_{\vec{k}}^+$ новые бозе-операторы, гамильтониан (3.3) приводим к диагональному виду

$$H^{(2)} = E_0 - \sum_{\vec{k}} \frac{E_{\vec{k}} R_{\vec{k}}^2}{1 - R_{\vec{k}}^2} + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}}^+ \sigma_{\vec{k}}^-. \quad (3.6)$$

Обозначения в (3.5) и (3.6) следующие:

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta X_{\vec{k}}}; \quad X_{\vec{k}} = -2C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{k}\vec{\lambda}; \quad R_{\vec{k}} = \frac{\Delta + X_{\vec{k}} - E_{\vec{k}}}{X_{\vec{k}}}. \quad (3.7)$$

Здесь мы введем малый параметр, о котором говорилось во введении. Будем предполагать, что $\Delta \gg C$ и что C и D одного порядка величины. Тогда соотношения

$$\varepsilon_0 = \frac{C}{\Delta} \quad \text{и} \quad \sigma_0 = \frac{D}{\Delta} \quad (3.8)$$

намного меньше единицы. В дальнейшем все расчёты проведем в линейном по ε_0 и σ_0 приближении. В этом приближении формула (3.6) переходит в

$$H^{(2)} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}^+ + \sum_{\vec{k}} [\Delta + X_{\vec{k}}(1 + \epsilon_{\vec{k}}^+)] a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^-, \quad (3.9)$$

где

$$\epsilon_{\vec{k}}^+ = \frac{C}{\Delta} \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{k} \vec{\lambda} \equiv \varepsilon_0 \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{k} \vec{\lambda} \ll 1. \quad (3.10)$$

Необходимо отметить, что для получения результата (3.9) функции преобразования (3.5) надо записать в квадратичном по ε_0 приближении, т.е. в следующем виде:

$$B_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}}; \quad b_{\vec{k}} = \left(1 + \frac{1}{2} \epsilon_{\vec{k}}^2\right) a_{\vec{k}}^- - (\epsilon_{\vec{k}}^+ + 2 \epsilon_{\vec{k}}^2) a_{-\vec{k}}^+. \quad (3.11)$$

Подставляя преобразование (3.11) в гамильтониан (3.4) и записывая полученное выражение по операторам $a_{\vec{k}}^{\pm}$ в порядке нормального произведения, легко убедиться, что из $H^{(4)}$ можно выделить следующую квадратичную форму :

$$2\ell C \varepsilon_0 \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^- - \frac{1}{2} \varepsilon_0 \sum_{\vec{k}} Y_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ + a_{-\vec{k}}^- a_{\vec{k}}^-), \quad (3.12)$$

где:

$$Y_{\vec{k}} = -2D \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{k} \vec{\lambda} . \quad (3.13)$$

Следовательно, полный квадратичный гамильтониан системы имеет следующий вид:

$$\vec{H}^{(2)} = H^{(2)} + 2\ell C \varepsilon_0 \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^+ \alpha_{\vec{k}} - \frac{1}{2} \varepsilon_0 \sum_{\vec{k}} Y_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}}^+ \alpha_{-\vec{k}}^+ + \alpha_{-\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}) . \quad (3.14)$$

Гамильтониан (3.14) диагонализуется в результате подстановки:

$$\alpha_{\vec{k}} = B_{\vec{k}} - \varepsilon_0 \theta_{\vec{k}} B_{-\vec{k}}^+ , \quad (3.15)$$

где

$$\theta_{\vec{k}} = \frac{D}{\Delta} \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{k} \vec{\lambda} = \sigma_0 \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{k} \vec{\lambda} \ll 1 , \quad (3.16)$$

и принимает следующий вид:

$$H^{(2)} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} [\Delta + X_{\vec{k}}(1 + \epsilon_{\vec{k}}) + 2\ell C \varepsilon_0] B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} . \quad (3.17)$$

Отметим, что третий член в (3.14) вносит в энергию элементарных возбуждений поправку $\delta E_{\vec{k}} = \varepsilon_0^2 Q_{\vec{k}} Y_{\vec{k}}$, которую в соответствии с используемым здесь линейным приближением отбрасываем. Также необходимо подчеркнуть, что все члены четвертого и высших порядков по операторам $\alpha_{\vec{k}}^+$, которые уже записаны в порядке нормального произведения, остаются и после замены (3.15) (в операторах $B_{\vec{k}}^+$) в порядке нормального произведения без дополнительных членов низших порядков.

На основе полученных здесь формул преобразований (3.11) и (3.15) и выражения (3.1) для функции Грина можно непосредственным расчётом убедиться, что для исследования связанных состояний эффективный бозонный гамильтониан в решеточном представлении выглядит следующим образом:

$$H = H^{(2)} + H^{(4)} + H^{(6)}, \quad (3.18)$$

где $H^{(2)}$ и $H^{(4)}$ определены формулами (3.3) и (3.4), а $H^{(6)}$ имеет следующий вид:

$$H^{(6)} = \frac{2}{3} \Delta \sum_{\vec{n}} B_{\vec{n}}^{+3} B_{\vec{n}}^3 + \frac{C}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} (B_{\vec{n}}^{+2} B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+2} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}+\vec{\lambda}} + B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+} B_{\vec{n}}^2 B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^2) + \frac{C(3+\sqrt{3})}{12} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} (B_{\vec{n}}^{+3} B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+} B_{\vec{n}}^2 B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+3} B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^2 + B_{\vec{n}}^{+2} B_{\vec{n}}^3 B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+} B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^{+2} B_{\vec{n}+\vec{\lambda}}^3 B_{\vec{n}}^{+} B_{\vec{n}}^2). \quad (3.19)$$

В (3.18) произведем замену:

$$B_{\vec{n}}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}} \left[\left(1 + \frac{1}{2} \epsilon_{\vec{k}}^2\right) B_{\vec{k}}^{\pm} - (\epsilon_{\vec{k}}^2 + 2\epsilon_{\vec{k}}^2 - \epsilon_0 \theta_{\vec{k}}^{\pm}) B_{-\vec{k}}^{\pm} \right] \quad (3.20)$$

и полученное выражение запишем в порядке нормального произведения, опуская при этом все члены, пропорциональные квадратам и высшим степеням малых величин ϵ_0 и σ_0 . Кроме того опустим все члены шестого порядка (записанные в порядке нормального произведения) с одинаковым числом операторов рождения и уничтожения, потому что их коммутатор с оператором $B_{\vec{\nu}}^{+} B_{\vec{\mu}}^{+}$, действуя на вакуум, дает нуль. Также опускаются и все члены, пропорциональные $\epsilon_0 X_{\vec{k}}^{\pm}$ (или $\sigma_0 Y_{\vec{k}}^{\pm}$ и т.д.), которые не содержат одинаковое число операторов рождения и уничтожения. В первом порядке теории возмущений они не дают вклада в энергию элементарных возбуждений. Во втором порядке теории возмущений их вклад пропорционален величине $\frac{\epsilon_0 X_{\vec{k}}^2}{E_2 - E_4} \approx \frac{\epsilon_0 X_{\vec{k}}^2}{2\Delta}$ (E_2 и E_4 , соответственно, энергии двух и четырех бозонов), т.е. он порядка ϵ_0^3 и как таковой несущественен. Аналогичное рассуждение приводит к тому, что необходимо сохранить все члены, не содержащие одинаковое число операторов рождения и уничтожения, которые пропорциональны величине $X_{\vec{k}}^{\pm}$ (или $Y_{\vec{k}}^{\pm}$), потому что во втором порядке теории возмущений их вклад будет порядка

ε_0 (или σ_0) Существенно отметить, что все члены типа $B_k^{\rightarrow 3} B_k^{\rightarrow}$ и $B_k^{\rightarrow} B_k^{\rightarrow 3}$, пропорциональные X_k^{\rightarrow} (или Y_k^{\rightarrow}), взаимно уничтожаются. Благодаря этому во втором порядке теории возмущений не возникает никаких поправок к энергии диагональной части гамильтониана (3.17). В результате указанной процедуры для анализа связанных состояний двух бозонов мы получим следующий эффективный гамильтониан:

$$H = \sum_k [\Delta + X_k^{\rightarrow}(1 + \varepsilon_k^{\rightarrow}) + 2\ell C \varepsilon_0] B_k^{\rightarrow} B_k^{\rightarrow} - \frac{1}{N} \sum_{k_1, k_2, k_3} (\Delta + X_{k_1+k_2-k_3}^{\rightarrow} + X_{k_2}^{\rightarrow} - Y_{k_3-k_2}^{\rightarrow} + \sqrt{3}\ell C \varepsilon_0 + 2X_{k_2}^{\rightarrow} \varepsilon_{k_3}^{\rightarrow} + \frac{1}{2} X_{k_2}^{\rightarrow} \varepsilon_{k_2}^{\rightarrow} + \frac{1}{2} X_{k_3}^{\rightarrow} \varepsilon_{k_3}^{\rightarrow} - 2\varepsilon_0 X_{k_3-k_2}^{\rightarrow}) B_{k_1}^{\rightarrow} B_{k_2}^{\rightarrow} B_{k_3}^{\rightarrow} B_{k_1+k_2-k_3}^{\rightarrow} - \quad (3.21)$$

$$- \frac{1}{2N^2} \sum_{k_1, \dots, k_5} \left(\frac{\sqrt{3}-3}{3} X_{k_1}^{\rightarrow} + X_{k_1+k_2-k_5}^{\rightarrow} - \right) (B_{k_1}^{\rightarrow} B_{k_2}^{\rightarrow} B_{k_3}^{\rightarrow} B_{k_4}^{\rightarrow} B_{k_5}^{\rightarrow} B_{k_1+k_2+k_3+k_4-k_5}^{\rightarrow} + \text{э.с.}) .$$

Уравнение для двухчастичной функции Грина $G^{(2)}$ (3.1) содержит и трехчастичную функцию Грина $G^{(3)}$ типа $\langle\langle BB | BBB \rangle\rangle$, которую дает член типа $B^{\rightarrow 4} B^{\rightarrow}$ из (3.21). Трехчастичная функция Грина, в свою очередь, выражается через двух-, трех- и четырехчастичную функции Грина. Двухчастичную функцию Грина в уравнении для $G^{(3)}$ даст член типа $B^{\rightarrow 2} B^{\rightarrow 4}$ из (3.21), а четырехчастичную - члены, которых в (3.21) нет, но которые в полном гамильтониане системы существуют (см. (3.2)). Двух- и четырехчастичная функции из уравнения для $G^{(3)}$ войдут в уравнение для $G^{(2)}$ с множителем типа $\frac{X_k^{\rightarrow 2}}{E_2 - E_4} \approx -\frac{X_k^{\rightarrow 2}}{2\Delta} \approx \varepsilon_0$. Четырехчастичная функция Грина выражается через саму себя и еще через двух-, трех- и пятичастичные функции Грина, причём в лучшем случае двухчастичная функция в этом уравнении появляется с множителем X_k^{\rightarrow} . Следовательно, после замены четырехчастичной функции $G^{(4)}$ в основном уравнении для $G^{(2)}$ перед двухчастичной функцией из уравнения для $G^{(4)}$ будет стоять множитель: $\frac{X_k^{\rightarrow 2}}{E_2 - E_6} \varepsilon_0 \approx -\frac{X_k^{\rightarrow 2}}{4\Delta} \varepsilon_0 \approx \varepsilon_0^2$, так что в данном приближении она

не входит в расчёт. Следовательно, уравнение для $G^{(2)}$, полученное в первом порядке теории возмущений, следует дополнить лишь той двухчастичной функцией, которая фигурирует в уравнении для $G^{(3)}$. Все остальные вклады выходят за рамки линейного по ε_0 приближения. Функции Грина высших порядков, которые после выделения двухчастичных функций остаются в уравнении для $G^{(2)}$, расцепим по правилу: $\langle\langle BV|VVVV\rangle\rangle \approx \langle\langle BV\rangle\rangle_0 \langle\langle BV|VV\rangle\rangle$, где $\langle\langle \dots \rangle\rangle_0$ означает усреднение с гамильтонианом (3.17), и, соответственно, положим равными нулю. Очевидно, что в результате указанной процедуры в уравнение для $G^{(2)}$ войдут все возможные поправки, линейные по ε_0 , так что в рамках выбранного приближения оно является точным.

Переходя от волновых векторов \vec{v} и $\vec{\mu}$ к новым волновым векторам \vec{Q} и \vec{q} посредством замены $\vec{v} = \frac{\vec{Q}}{2} + \vec{q}$ и $\vec{\mu} = \frac{\vec{Q}}{2} - \vec{q}$ (волновой вектор суммирования \vec{k} переходит в $\frac{\vec{Q}}{2} + \vec{q}'$), для двухчастичной функции Грина получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned} & \{E - 2\Delta + 4C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda} - 4\ell C \varepsilon_0 + 4C \varepsilon_0 [(\sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda})^2 + \\ & + (\sum_{\vec{\lambda} > 0} \sin \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \sin \vec{q}\vec{\lambda})^2]\} \Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}) = \\ & = \frac{f_{\vec{Q}}(\vec{q})}{2\pi} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}'} \{-2\Delta + 4C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda} + 4C \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}'\vec{\lambda} \} \Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}') \\ & - 4D \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{q}\vec{\lambda} \cos \vec{q}'\vec{\lambda} - 4\ell C \varepsilon_0 + 8C \varepsilon_0 \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda} \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}'\vec{\lambda} + \\ & + 2C \varepsilon_0 [(\sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}\vec{\lambda})^2 + (\sum_{\vec{\lambda} > 0} \sin \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \sin \vec{q}\vec{\lambda})^2] + 2C \varepsilon_0 [(\sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \cos \vec{q}'\vec{\lambda})^2 + \\ & + (\sum_{\vec{\lambda} > 0} \sin \frac{\vec{Q}\vec{\lambda}}{2} \sin \vec{q}'\vec{\lambda})^2] - 12C \varepsilon_0 \sum_{\vec{\lambda} > 0} \cos \vec{q}\vec{\lambda} \cos \vec{q}'\vec{\lambda} \} \Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}'), \end{aligned}$$

где:

$$\Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}) = G^{(2)} \left\{ \frac{\vec{Q}}{2} + \vec{q}, \frac{\vec{Q}}{2} - \vec{q} \right\}; \Gamma_{\vec{Q}}(\vec{q}) = \Gamma_{\vec{Q}}(-\vec{q}); f_{\vec{Q}}(\vec{q}) = \gamma \left(\frac{\vec{Q}}{2} + \vec{q} \right) + \gamma \left(\frac{\vec{Q}}{2} - \vec{q} \right). \quad (3.23)$$

Уравнение (3.22) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма с вырожденным ядром и его можно привести к системе линейных алгебраических уравнений. Однако для нахождения энергий связанных состояний нужен численный анализ определителя системы. Здесь несколько более подробно рассмотрим лишь одномерный случай. При $\ell=1$ уравнение (3.22) принимает следующий вид:

$$\Gamma_{\vec{Q}}(q) = \frac{i}{\pi} \frac{f_{\vec{Q}}(q)}{\psi_{\vec{Q}}^{(0)}(q)} + \sum_{l=1}^3 \frac{\psi_{\vec{Q}}^{(l)}(q)}{\psi_{\vec{Q}}^{(0)}(q)} J_{l\vec{Q}}, \quad (3.24)$$

где:

$$\psi_{\vec{Q}}^{(0)}(q) = \vartheta_0 \left(2 \cos^2 \frac{Q}{2} - 1 \right) \cos^2 q + \cos \frac{Q}{2} \cos q - \left(\beta + \vartheta_0 \cos^2 \frac{Q}{2} \right),$$

$$\psi_{\vec{Q}}^{(1)}(q) = \frac{1}{2} \vartheta_0 \left(2 \cos^2 \frac{Q}{2} - 1 \right) \cos^2 q + \cos \frac{Q}{2} \cos q - \left(\eta + \vartheta_0 \cos^2 \frac{Q}{2} \right), \quad (3.25)$$

$$\psi_{\vec{Q}}^{(2)}(q) = \left[\tau + \vartheta_0 \left(3 - 2 \cos^2 \frac{Q}{2} \right) \right] \cos q + \cos \frac{Q}{2}; \quad \psi_{\vec{Q}}^{(3)}(q) = \frac{1}{2} \vartheta_0 \left(2 \cos^2 \frac{Q}{2} - 1 \right),$$

$$J_{l\vec{Q}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \Gamma_{\vec{Q}}(q) \cos^{l-1} q dq; \quad (j=1,2,3).$$

Определитель системы имеет следующий вид:

$$\Lambda_{\vec{Q}} = |\delta_{l,l'} - M_{ll'}(\vec{Q})|; \quad M_{ll'}(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\psi_{\vec{Q}}^{(l')}(q)}{\psi_{\vec{Q}}^{(0)}(q)} \cos^{l-1} q dq; \quad (l, l' = 1, 2, 3).$$

Приравнивая Λ_Q к нулю, получим полюса функции $\Gamma_Q(q)$, которые определяют энергии связанных состояний. Хотя интегралы, фигурирующие в (3.26), легко решаются, алгебраическое уравнение по β требует численного анализа. При $Q = \frac{\pi}{2}$ уравнение $\Lambda_Q = 0$ заметно упрощается и дает следующие решения:

$$\epsilon_1\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad \text{и} \quad \epsilon_2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 2\Delta - 2D - \frac{C^2}{D} + 2C \epsilon_0 \left(1 + \frac{C^2}{D^2}\right). \quad (3.27)$$

Сравнивая это с соответствующими результатами (2.19) приближения ГЛГ

$$E_1\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad \text{и} \quad E_2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 2\Delta - 2D - \frac{C^2}{D}, \quad (3.28)$$

приходим к выводу, что учёт несохранения приводит к завышению энергии связанных состояний. Что касается свободных состояний, ситуация прямо противоположная - учёт несохранения занижает энергию свободных состояний, полученную в приближении ГЛГ. Следовательно, можно придти к выводу, что одним из эффектов несохранения квазичастиц в системе является уменьшение энергетической щели между свободными и связанными состояниями.

4. Заключение

Основной вывод, к которому в результате изложенного можно придти, следующий: анализ связанных состояний в системах, в которых полное число квазичастиц не сохраняется, можно провести с желаемой степенью точности относительно малого параметра ϵ_0 . Линейное по ϵ_0 приближение, в котором здесь были получены основные соотношения для связанных состояний, не всегда может оказаться удовлетворительным. Изложенная процедура, однако, позволяет без принципиальных трудностей провести дальнейшее уточнение теории.

Здесь, к сожалению, не приводился численный расчёт энергий связанных состояний. В этом смысле анализ не является полным. Аналитическим путем можно было сделать лишь вывод о том, что одним из эффектов несохранения квазичастиц является уменьшение энергетической щели между свободными и связанными состояниями.

Литература

1. I. Villian and S. Stamenkovič. Phys.Stat.Sol., 15, 585 (1966).
2. L. Novakovič. J. Phys. Chem. Sol., 27, 1469 (1966).
3. D. Mattis. The Theory of Magnetism. Harper, New York (1965).
4. D.I. Lalovič, B.S. Tošič, J.B. Vujaklija and R.B. Žakula. Nuovo Cimento 68, 79 (1970).
5. В.М. Агранович, Б.С. Тошич. ЖЭТФ, 53, 149 (1967).
6. А.И. Ахизер, В.Г. Барьяхтар, С.В. Пелетминский. "Спиновые волны", Наука, Москва, 1969 г.
7. С.В. Тябликов. "Методы квантовой теории магнетизма", Наука, Москва, 1965 г.

Рукопись поступила в издательский отдел

28 июня 1971 г.