

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



С 326

С-143

P4 - 7384

3710/2-73

Б.И. Садовников

О ФУНКЦИЯХ ГРИНА

ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

В ПРИБЛИЖЕНИИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

1973

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7384

Б. И. Садовников

О ФУНКЦИЯХ ГРИНА
ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ
В ПРИБЛИЖЕНИИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

Одним из эффективных способов исследования систем многих частиц является хорошо известный метод самосогласованного поля.

Возникший в квантовой механике для расчета спектров атомов, метод самосогласованного поля Хартри-Фока^{*)} нашел свое применение также и в теории плазмы, кристаллического состояния,^{**)} где с его помощью был получен целый ряд важных результатов.

В связи с работами по сверхпроводимости И.Н.Воголобовым был сформулирован обобщенный метод самосогласованного поля [1], существенно обобщающий метод Хартри-Фока. Отметим здесь, что обобщенный метод самосогласованного поля широко применяется также в теории ядра [2].

довольно плодотворным оказывается объединение метода самосогласованного поля с аппаратом двумерных статистических функций Грина, которые содержат достаточно полную информацию о системе и непосредственно связаны с физическими характеристиками, что существенно усиливает результаты, исходящие, например, из обычных кинетических уравнений. При этом структура уравнений для функций Грина допускает значительное упрощение.

Вопрос о связи уравнений обобщенного метода самосогласованного поля с уравнениями для функций Грина обсуждался нами в [3].

Здесь на примере кристаллической системы мы покажем, что приближение самосогласованного поля обладает тем свойством, что

*) D.R.Hartree, Proc.Cambr.Phil.Soc., 24, 89 (1927).

в.А.Фок, J. Physik, 61, 126 (1950)

**) А.А.Власов, "Теория многих частиц", ГИИТ, 1950.

И.И.Базаров, "Статистическая теория кристаллического состояния", издательство МГУ, 1972.

полученные с его помощью функции Грина удовлетворяют теореме Л.В. Догельцова об особенностях типа $\frac{1}{\rho^2}$ [4].

Поскольку при рассмотрении кристаллической системы можно приближенно полагать, что частицы фиксированы в узлах решетки, будем исходить из уравнения для функций Грина в приближении Хартри.

Для этой цели удобно, как и в наших работах [5, 6], использовать метод вариаций - провести соответствующее "расщепление" в уравнениях для одновременных функций распределения [7], а затем уже перейти к функциям Грина. Заметим, что получающиеся таким образом уравнения представляют неоднородные уравнения для функций Грина. Если мы опустим источники, то получим систему однородных уравнений, и условием существования их нетривиального решения будет равенство нулю детерминанта системы. Значения E , определенные таким образом, дают спектр элементарных возбуждений.

Такая методика позволяет с единой точки зрения рассмотреть целый ряд физических моделей и предоставляет некоторые преимущества. В частности, если в системе имеется вырождение, то применение этого метода "не портит" теоремы о $\frac{1}{\rho^2}$.

§ 1.

В соответствии со сказанным выше запишем уравнение Хартри в форме ^(*):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \delta Z(t, x, x') = -\frac{i}{2m} (\Delta_x - \Delta_{x'}) \delta Z(t, x, x') + \{U^0(x) - U^0(x')\} \delta Z(t, x, x') + \{ \delta U(x) - \delta U(x') \} Z^0(t, x, x') + \{ \delta \varphi(x) - \delta \varphi(x') \} Z^0(t, x, x'). \quad (1)$$

*) Вывод этого уравнения дан, например, в нашей работе [6].

Здесь введены следующие обозначения:

$\hat{D}(t, x, x')$ - одночастичный оператор плотности в t -представлении, $\hat{D}^{(0)}(x, x')$ - его равновесное значение,

$$U^{(0)}(x) = \int \Phi(x-x') \rho^{(0)}(x') dx', \quad \rho^{(0)}(x) = \hat{D}^{(0)}(x, x)$$

$\Phi(x)$ - потенциал парного взаимодействия,

$$\delta U(t, x) = \int \Phi(x-x') \delta \rho(t, x') dx', \quad \delta \rho(t, x) = \delta \hat{D}(t, x, x')$$

"Источники" возьмем в форме

$$\delta \eta(t, x) = e^{-i\Omega t} \delta \eta(x), \quad \delta \eta(x) = e^{i(\psi \cdot x)} \delta c, \quad \delta c - \text{бесконечно малое} \\ c - \text{число,}$$

при этом

$$\delta \hat{D}(t, x, x') = e^{i\Omega t} \delta \hat{D}(x, x'), \quad \delta \rho(t, x) = e^{i\Omega t} \delta \rho(x)$$

Тогда, если вариация гамильтониана в представлении второго кванта имеет вид

$$\delta H = \int dx \psi^\dagger(x) \delta \eta(x) \psi(x) e^{-i\Omega t} = \int_{\Omega}^{\Omega} e^{i\Omega t} \delta c, \quad \text{где} \\ \Omega = \Omega_0 + i0$$

$$\rho_k = \int \rho(x) e^{-i(k \cdot x)} dx, \quad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k'} \psi_{k'} e^{i(k' \cdot x)}$$

то, согласно теореме о вариации средних значений [5], функция Грина "плотность-плотность" определяется следующим образом:

$$i\omega \langle \rho_k : \rho_{-k} \rangle_{\Omega} = \frac{\int \delta \rho(x) e^{-i(k \cdot x)} dx}{\delta c} \quad (2)$$

Следовательно, уравнение (1) можно переписать в форме:

$$\Omega \delta \hat{D}(x, x') = -\frac{1}{2m} (\Delta_x - \Delta_{x'}) \delta \hat{D}(x, x') + \int U^{(0)}(x) \rho^{(0)}(x') \delta \hat{D}(x, x') + \\ + \int \delta U(x) - \delta U(x') \hat{D}^{(0)}(x, x') + \int \delta \eta(x) \delta \eta(x') \hat{D}^{(0)}(x, x')$$

делаем и рассмотрение

$$\delta j_a^i(x) = \frac{i}{2} \left\{ \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^i} \right) \delta \mathcal{D}(x, x') \right\}_{x'=x}$$

заметим далее, что имеют место соотношения:

$$\Delta_x - \Delta_{x'} = \sum_{a=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_a^i \partial x_a^i} - \frac{\partial^2}{\partial x_a^j \partial x_a^j} \right) = \sum_{a=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_a^i \partial x_a^i} + \frac{\partial^2}{\partial x_a^j \partial x_a^j} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right),$$

$$\{(\Delta_x - \Delta_{x'}) \delta \mathcal{D}(x, x')\}_{x=x'} = \sum_{a=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_a^i \partial x_a^i} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right) \delta \mathcal{D}(x, x') \right\}_{x=x'},$$

тогда, полагая в уравнении (3) $x=x'$, приходим к уравнению для $\delta j_a^i(x)$:

$$\Omega \delta p(x) + m \frac{i}{2} \sum_{a=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_a^i} \delta j_a^i(x) = 0. \quad (4)$$

Умножим теперь уравнение (3) на $\frac{i}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right)$, а затем положим $x=x'$, заметив при этом, что

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right) (\Delta_x - \Delta_{x'}) = \frac{i}{2m} \sum_{a=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_a^i \partial x_a^i} + \frac{\partial^2}{\partial x_a^j \partial x_a^j} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right).$$

Первый член правой части уравнения (3) удобно представить в виде:

$$\left\{ \frac{i}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right) (\Delta_x - \Delta_{x'}) \delta \mathcal{D}(x, x') \right\}_{x=x'} = \frac{i}{m} \sum_{(a)} \frac{\partial}{\partial x_a^i} \delta \gamma_{ap}^i(x),$$

где мы обозначим

$$\delta \gamma_{ap}^i(x) = \frac{i}{2} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_b^i} - \frac{\partial}{\partial x_b^j} \right) \delta \mathcal{D}(x, x') \right\}_{x=x'} \quad (5)$$

Заметим также, что для произвольной функции $F(x)$

$$\left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_a^i} - \frac{\partial}{\partial x_a^j} \right) \frac{i}{2} (F(x) - F(x')) \delta \mathcal{D}(x, x') \right\}_{x=x'} = -i \frac{\partial F(x)}{\partial x_a^i} \delta p(x)$$

Учитывая эти соотношения, получаем из (3)

$$\Omega \delta_{j\alpha}^i(x) = \frac{i}{m} \sum_{(\mu, \nu)} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \delta T_{\mu\nu}(x) - i \frac{\partial U^{(\mu, \nu)}(x)}{\partial x_\alpha} \delta_{j\mu}(x) -$$

$$- i \frac{\partial \delta U(x)}{\partial x_\alpha} \rho^{(\nu)}(x) - i \frac{\partial \delta \rho(x)}{\partial x_\alpha} \rho^{(\nu)}(x).$$

Умножим это уравнение на Ω и воспользуемся соотношением (4), в результате найдем

$$\Omega^2 \delta_{j\alpha}^i(x) = \frac{i\Omega}{m} \sum_{(\mu, \nu)} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \delta T_{\mu\nu}(x) - \frac{i}{m} \frac{\partial U^{(\mu, \nu)}(x)}{\partial x_\alpha} \sum_{(\mu, \nu)} \delta_{j\mu}^{(\nu)}(x) -$$

$$- \frac{i}{m} \rho^{(\nu)}(x) \sum_{(\mu, \nu)} \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \int \Phi(x-x') \delta_{j\alpha}^i(x') dx' - i\Omega \frac{\partial \delta \rho(x)}{\partial x_\alpha} \rho^{(\nu)}(x) \quad (6)$$

§ 2.

Представим $\delta \mathcal{L}(x, x')$ в виде разложения по полному набору некоторых ортонормированных функций $\varphi_r(x)$:

$$\delta \mathcal{L}(x, x') = \sum_{(r, r')} \varphi_r(x) \varphi_{r'}^*(x') \delta c_{rr'} \quad (7)$$

причем в качестве $\varphi_r(x)$ удобно взять собственные функции одночастичного уравнения

$$\int -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(x) \varphi_r(x) = E_r \varphi_r(x); \quad \int \varphi_r(x) \varphi_{r'}^*(x) dx = \delta_{rr'}$$

при этом

$$\delta \mathcal{L}(x, x') = \sum_{(r, r')} W_{rr'} \varphi_r(x) \varphi_{r'}^*(x'),$$

где $W_{rr'}$ — числа заполнения одночастичных состояний.

Тогда уравнение (3) может быть приведено к форме:

$$\sum_{(r, r')} (\Omega - E_r + E_{r'}) \varphi_r(x) \varphi_{r'}^*(x') \delta c_{rr'} =$$

$$= \left\{ (\delta U(x) - \delta U(x')) + (\delta \rho(x) - \delta \rho(x')) \right\} \sum_{(r, r')} W_{rr'} \varphi_r(x) \varphi_{r'}^*(x') \quad (8)$$

используем свойство полноты системы функций $\varphi_r(x)$:

$\sum_{r,s} \varphi_r^*(x') \varphi_s(x) \cdot \delta(x', x)$, последний член уравнения (8) можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \int \delta U(x) \delta U(x') \left\{ \sum_r w_r \varphi_r(x) \varphi_r^*(x') \right\} = \\ & = \sum_{(l,m)} w_l \cdot w_m \int \delta U(x) \varphi_l^*(x) \varphi_l(x) \varphi_m(x) \varphi_m^*(x') dx \end{aligned}$$

Умножим теперь уравнение (8) на $\varphi_\nu^*(x) \varphi_\mu(x')$, и, интегрируя по x и x' , получим:

$$(\Omega - E_\nu + E_\mu) \delta C_{\nu\mu} = (w_\mu w_\nu) \int \{ \delta U(x) + \delta \eta(x) \} \varphi_\nu(x) \varphi_\mu^*(x') dx,$$

откуда

$$\delta C_{\nu\mu} = \frac{w_\mu w_\nu}{\Omega - E_\nu + E_\mu} \int \{ \delta U(x) + \delta \eta(x) \} \varphi_\nu(x) \varphi_\mu^*(x) dx.$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned} \delta U(x) &= \int \psi(x, x') \delta \rho(x') dx' = \\ &= - \frac{i}{m\Omega} \left[\Phi(x, x') \sum_{(p)} \frac{\partial}{\partial x_p} \delta j_p^*(x') \right], \end{aligned}$$

имеем для коэффициентов $\delta C_{\nu\mu}$ следующее выражение:

$$\begin{aligned} \delta C_{\nu\mu} &= i \frac{w_\mu w_\nu}{\Omega - E_\nu + E_\mu} \cdot \frac{1}{m\Omega} \sum_{(p)} \iint \frac{\partial \Phi(x, x')}{\partial x_p} \delta j_p^*(x') \varphi_\nu(x) \varphi_\mu^*(x) dx dx' + \\ &+ \frac{w_\mu w_\nu}{\Omega - E_\nu + E_\mu} \int \delta \eta(x) \varphi_\nu(x) \varphi_\mu^*(x) dx. \end{aligned}$$

Умножая это уравнение на $\varphi_\nu(x) \varphi_\mu^*(x')$ и суммируя по ν, μ , возвращаясь снова к функции $\delta \chi(x, x')$:

$$\begin{aligned} \delta \chi(x, x') &= \frac{i}{m\Omega} \sum_{(p,r,s)} \frac{w_r w_s}{\Omega + E_r - E_s} \iint \frac{\partial \{ \varphi_r(x) \varphi_s^*(x') \}}{\partial x_p} \Phi(x, x') \delta j_p^*(x') dx, \quad (9) \\ &+ \sum_{(r,s)} \varphi_r(x) \varphi_s^*(x') \frac{w_r w_s}{\Omega + E_r - E_s} \int \delta \eta(x) \varphi_r(x) \varphi_s^*(x) dx. \end{aligned}$$

Применяя к уравнению (3) операцию $\{ \frac{\partial}{\partial x_1} (\frac{\partial}{\partial x_2} \dots \frac{\partial}{\partial x_n}) (\frac{\partial}{\partial x_2} \dots \frac{\partial}{\partial x_n}) \dots \}$ и учитывая определение (5), получаем:

$$\delta \mathcal{L}_{\text{ар}}(x) = \frac{i}{m\Omega} \sum_{(y,y')} \left(\frac{\partial^2 K_{\text{ар}}(x,y/\Omega)}{\partial x_n \partial y} \right) \Phi(y,y') \delta j'_n(y') dy dy' + \int K_{\text{ар}}(x,y/\Omega) \delta \eta(y) dy, \quad (10)$$

где через $K_{\text{ар}}(x,y/\Omega)$ мы обозначили

$$K_{\text{ар}}(x,y/\Omega) = \frac{i}{4} \sum_{\mu, \nu} \frac{W_{\mu} - W_{\nu}}{\Omega + E_{\mu} - E_{\nu}} \langle \varphi_{\mu}(y) | \rho_{\nu}^{\dagger}(y') \rangle \{ (\frac{\partial}{\partial x_1} \dots \frac{\partial}{\partial x_n} K_{\text{ар}}^{\mu, \nu}(\Omega)) \langle \varphi_{\mu}(x) | \rho_{\nu}(x') \rangle \} \quad (11)$$

Подставим теперь выражение (10) в уравнение (6):

$$\begin{aligned} \Omega^2 \delta j'_n(x) + \sum_{(y,y')} m^2 \int \frac{\partial^2 K_{\text{ар}}(x,y/\Omega)}{\partial x_n \partial y} \Phi(y,y') \delta j'_n(y') dy dy' + \\ + \frac{1}{m} \frac{\partial U^{\text{ар}}(x)}{\partial x_n} \sum_{(y)} \frac{\partial \delta j'_n(x)}{\partial x_y} + \frac{1}{m} \rho^{\text{ар}}(x) \sum_{(y)} \frac{\partial}{\partial x_n \partial x_y} \int \Phi(x-x') \delta j'_n(x') dx' = \\ = i \Omega \frac{\partial \delta \eta(x)}{\partial x_n} \rho^{\text{ар}}(x) + \frac{i \Omega}{m} \sum_{(y)} \frac{\partial}{\partial x_n} \int K_{\text{ар}}(x,y/\Omega) \delta \eta(y) dy \end{aligned} \quad (12)$$

Положим здесь

$$\frac{1}{m\Omega} \delta j'_n(x) = \delta J_n(x),$$

тогда для $\delta J_n(x)$ получим следующее уравнение:

$$\Omega^2 \delta J_n(x) + \sum_{(y,y')} m^2 \int \frac{\partial^2 K_{\text{ар}}(x,y/\Omega)}{\partial x_n \partial y} \Phi(y,y') \delta J'_n(y') dy dy' +$$

* Заметим, что аналогичное уравнение рассматривалось также в работе [6] в связи с изучением спектра коллективных колебаний кристалла

$$+ \frac{i}{m} \frac{\delta U^{(0)}(x)}{\delta x_a} \sum_{\beta} \frac{\delta J_{\beta}(x)}{\delta x_{\beta}} + \frac{i \rho^{(0)}(x)}{m} \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left(\phi(x-x') \delta J_{\beta}(x') dx' \right) =$$

$$\therefore \frac{i}{m} \rho^{(0)}(x) \frac{\delta J_{\beta}(x)}{\delta x_a} + \frac{i}{m} \sum_{\beta} \int \frac{\delta K_{\beta}(x, y, \Omega)}{\delta x_{\beta}} \delta J_{\beta}(y) dy \quad (13)$$

легко установить связь между введенными функциями $\delta J_{\alpha}(x)$ и функциями Ландау - "плотность-плотность". Действительно, учитывая соотношения (2) и (4), получим

$$\langle \rho_{\alpha} : \rho_{\beta} \rangle_{\Omega} = -\frac{i}{2\pi} \int_{\Omega} e^{-ikx} \sum_{\alpha'} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} \frac{\delta J_{\alpha}(x)}{\delta c} dx \quad (14)$$

§ 3.

Установим теперь некоторые тождества.

напомним, что равновесная функция распределения $Z^{(0)}(x, x')$ удовлетворяет уравнению

$$-\frac{1}{2m} (\Lambda_x \Lambda_{x'}) Z^{(0)}(x, x') + \{ U^{(0)}(x) - U^{(0)}(x') \} Z^{(0)}(x, x') = 0,$$

$$U^{(0)}(x) = \int \phi(x-z) \rho^{(0)}(z) dz.$$

действуем на это уравнение операцией $(\frac{\partial}{\partial x_a} + \frac{\partial}{\partial x'_a})$. Тогда, обозначив через $I_a^{(0)}(x, x')$ величину $(\frac{\partial}{\partial x_a} + \frac{\partial}{\partial x'_a}) Z^{(0)}(x, x')$, получим

$$\frac{1}{2m} (\Lambda_x \Lambda_{x'}) I_a^{(0)}(x, x') + \{ U^{(0)}(x) - U^{(0)}(x') \} I_a^{(0)}(x, x') =$$

$$+ \left\{ \frac{\partial U^{(0)}(x)}{\partial x_a} - \frac{\partial U^{(0)}(x')}{\partial x'_a} \right\} Z^{(0)}(x, x') = 0, \quad (15)$$

$$\text{где } \frac{\partial U^{(0)}(x)}{\partial x_a} = \int \phi(x-z) \frac{\partial \rho^{(0)}(z)}{\partial x_a} dz$$

Поскольку

$$\frac{\partial^2 f^{(0)}(x)}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 f^{(0)}(x)}{\partial x_2^2} = \left\{ (\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) \mathcal{L}^{(0)}(x) \right\} \cdot x^{-1} \Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x),$$

уравнение (15) принимает вид

$$-\frac{1}{2m} (\Delta x \cdot \Delta x) : \Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x) + \left\{ U^{(0)}(x) \cdot U^{(0)}(x) \right\} \Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x) + \quad (16)$$

$$+ \int \Phi(x-z) \Gamma_{\alpha}^{(0)}(z, x) dz - \int \Phi(x'-z) \Gamma_{\alpha}^{(0)}(z, x) dz \left\{ \Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x) \right\} = 0$$

Сравнивая это уравнение с уравнением (3), видим, что $\delta^2 \psi(x, x) = \Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x)$, является решением уравнения (16) при $\Omega = 0$, $\delta \eta(x) = 0$, т.е. $\delta^2 \psi(x, x) \Big|_{\substack{\Omega=0 \\ \delta \eta=0}} = (\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) \mathcal{L}^{(0)}(x, x)$.

Напомним, что уравнение для $\delta \mathcal{D}(x, x')$ мы получали в форме

$$\delta \mathcal{D}(x, x') = \sum_{(x, x')} \varphi_{\nu}(x) \varphi_{\nu}^*(x') \frac{W_{\nu}^* W_{\nu}}{\Omega + \epsilon_{\nu} - \epsilon_{\nu}'} \cdot \left\{ \Delta x, \varphi_{\nu}(x) \varphi_{\nu}^*(x') \right\} \delta^2 \psi(x, x) + \delta \eta(x)$$

Полагая в этом уравнении $\Omega = 0$, $\delta \eta(x) = 0$ и подставляя решение для $\delta \mathcal{D}(x, x') = \Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x')$, получим тождество:

$$\Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x) = \sum_{(x, x')} \varphi_{\nu}(x) \varphi_{\nu}^*(x') \frac{W_{\nu}^* W_{\nu}}{\epsilon_{\nu} - \epsilon_{\nu}'} \cdot \int d^2 z d^2 x' \Phi(x-z) \dots \varphi_{\nu}(z) \varphi_{\nu}^*(x') \Gamma_{\alpha}^{(0)}(z, x')$$

или, представляя $\Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x)$ в виде

$$\Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x) = (\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) \mathcal{L}^{(0)}(x, x) \Big|_{x=x'} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}^{(0)}(x)}{\partial x_1} \quad (17)$$

будем иметь

$$\Gamma_{\alpha}^{(0)}(x, x') = \sum_{(y, y')} \varphi_{\alpha'}(y) \varphi_{\alpha}^*(y') \frac{W_{\alpha} W_{\alpha'}}{L_{\alpha} L_{\alpha'}} \int d z_1 d z_2 \Phi(z_1 - z_2) \varphi_{\alpha}(z_1) \varphi_{\alpha'}^*(z_2) \frac{\partial^2 \rho^{\alpha}(z_1)}{\partial x_{\alpha}^2} \quad (18)$$

введем еще одно обозначение

$$\sum_{\alpha, \alpha'}^{\lambda} (x) = \frac{1}{q} \left\{ (\frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}) (\frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}) \right\} \rho_{\lambda}^{(\alpha)}(x, x') \Big|_{x=x'} \quad (19)$$

из тождества (18) при условии (11) следует, что

$$\begin{aligned} S_{\alpha, \alpha'}^{\lambda}(x) &= \int K_{\alpha, \alpha'}(x, y/0) \Phi(y, y') \frac{\partial^2 \rho^{\alpha}(y')}{\partial y_{\lambda}^2} dy dy' = \\ &= - \int \frac{\partial K_{\alpha, \alpha'}(x, y/0)}{\partial y_{\lambda}} \Phi(y, y') \rho^{\alpha}(y') dy dy' \end{aligned} \quad (20)$$

Применим к уравнению (16) операцию $\left\{ (\frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}) \dots \right\}_{x=x'}$, тогда, заменив индекс α на λ , будем иметь:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \left\{ (\frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}) (\frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}) \right\} \rho_{\lambda}^{(\alpha)}(x, x') \Big|_{x=x'} + \left\{ (\frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}) (U^{\alpha}(x) U^{\alpha}(x')) \right\} \rho_{\lambda}^{(\alpha)}(x, x') \Big|_{x=x'} + \\ & + \left\{ (\frac{\partial}{\partial x_{\alpha'}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}) \right\} \left\{ (1 + \epsilon) \Phi(x, x') \rho_{\lambda}^{(\alpha)}(x, x') + \mathcal{B}^{(\alpha)}(x, x') \right\} \Big|_{x=x'} = 0. \end{aligned}$$

Это тождество с учетом (17) и (19) можно переписать в виде

$$\frac{1}{m} \sum_{(\alpha)} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} S_{\alpha, \alpha'}^{\lambda}(x) - \frac{\partial U^{\alpha}(x)}{\partial x_{\alpha}} \frac{\partial \rho^{\alpha}(x)}{\partial x_{\lambda}} - \int \frac{\partial^2 \Phi(x, x')}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\lambda}} \rho^{\alpha}(z) \rho^{\alpha}(x) dz = 0,$$

или, принимая во внимание соотношение (20), получаем окончательно основное тождество в форме:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \sum_{(\alpha)} \int \frac{\partial^2 K_{\alpha, \alpha'}(x, y/0)}{\partial x_{\alpha} \partial y_{\lambda}} \Phi(y, y') \rho^{\alpha}(y') dy dy' + \\ & + \frac{\partial U^{\alpha}(x)}{\partial x_{\alpha}} \frac{\partial \rho^{\alpha}(x)}{\partial x_{\lambda}} + \int \frac{\partial^2 \Phi(x, x')}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\lambda}} \rho^{\alpha}(z) \rho^{\alpha}(x) dz = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Сопоставляя тождество (21) с уравнением (12) для $\delta J_{\alpha}^i(x)$, заключаем, что при $\Omega=0$, $\delta J_{\alpha}^i(x)=0$ существует решение $\delta J_{\alpha}^i(x) = C_{\alpha} \rho^{(0)}(x)$, обращающее уравнение (12) в тождество (21).

§ 4.

Рассмотрим решения, бесконечно близкие к $\delta J_{\alpha}^i(x) = C_{\alpha} \rho^{(0)}(x)$, полагая $\delta J_{\alpha}^i(x) = C_{\alpha} \rho^{(0)}(x) e^{i(\vec{k}, \vec{x})}$, где k — мало, умножим уравнение (13) на $e^{-i(\vec{k}, \vec{x})}$ и проинтегрируем его по x по объему элементарной ячейки, причем $\int_{V_1} \rho^{(0)}(x) dx = 1$, в результате получим

$$\begin{aligned} & \Omega^2 C_{\alpha} + \frac{1}{m^2} \sum_{(p, q)} \int e^{-ikx} K_{\alpha p}(xy/\Omega) (-ik_p) \frac{\partial \Phi(y, y')}{\partial y} C_p \rho^{(0)}(y') e^{-iky'} dy dy' dx + \\ & + \frac{1}{m} \sum_{(p, q)} C_p (ik_p) \int e^{-ikx} \frac{\partial U^{(0)}(x)}{\partial x_{\alpha}} \rho^{(0)}(x) e^{ikx} dx - \\ & - \frac{1}{m} \sum_{(p, q)} C_p \int e^{-ikx} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \Phi(x-x') \rho^{(0)}(x') dx' \right\} \rho^{(0)}(x) e^{ikx} dx + \\ & + \frac{1}{m} \sum_{(p, q)} C_p \int e^{-ikx} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \Phi(x-x') \right\} \rho^{(0)}(x') \rho^{(0)}(x) e^{ikx'} dx' dx = \\ & = \frac{Q_{\alpha}}{m} \rho \int e^{-i(k-p)x} \rho^{(0)}(x) dx - \frac{ic}{m^2} \sum_{(p, q)} k_p \int K_{\alpha p}(xy/\Omega) e^{i(y-y') \cdot kx} dy dy' dx \end{aligned} \quad (22)$$

Заметим, что поскольку $\Phi(x-x') = \Phi'(x'-x)$, третий член левой части уравнения (22) равен нулю.

Полагая в уравнении (22) $q = G+k$, где G — вектор обратной решетки, перепишем его в форме:

$$\Omega^2 C_{\alpha} + \frac{1}{m^2} \sum_{(p, q)} C_p (ik_p) \int K_{\alpha p}(xy/\Omega) \frac{\partial \Phi(y, y')}{\partial y} \rho^{(0)}(y') e^{ik(y-x)} dx dy dy' + (23)$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{m} \sum_{(p)} C_p \int \frac{\partial^2 \phi(x-x')}{\partial x_x \partial x_p} \rho^{(p)}(x) \rho^{(p)}(x') \left\{ -2i \sin^2 \frac{k(x-x')}{\lambda} \right\} dx dx' = \\
 & = \frac{k_x + \epsilon_x}{m} \rho^{(p)} \epsilon_c - \frac{\delta c}{m^2} \sum_{(p)} k_p \int \chi_{pp}(x, y/\Omega) e^{ik(y-x)} e^{i\delta y} dx dy.
 \end{aligned}$$

Рассматривая уравнение (23) при малых k , замечаем, что третий член левой части уравнения имеет порядок k^2 , а в правой части мы можем пренебречь вторым членом по сравнению с первым. Более подробно рассмотрим второй член левой части уравнения (23).

Нетрудно показать, что для кристалла, имеющего центр симметрии,

$$K_{pp}(-x, -y/\Omega) = K_{pp}(x, y/\Omega).$$

Принимая во внимание это свойство, видим, что

$$\begin{aligned}
 & \int K_{pp}(x, y/\Omega) \frac{\partial \phi(y-y')}{\partial y'_k} \rho^{(p)}(y') e^{ik(y'-x)} dx dy dy' = \\
 & = - \int K_{pp}(x, y/\Omega) \frac{\partial \phi(y-y')}{\partial y'_k} \rho^{(p)}(y') e^{-ik(y'-x)} dx dy dy'.
 \end{aligned}$$

Интересуясь случаем малых значений k и Ω , перепишем это выражение в виде:

$$\begin{aligned}
 & \int K_{pp}(x, y/0) \frac{\partial \phi(y-y')}{\partial y'_k} \rho^{(p)}(y') 2i \sin\{k(y'-x)\} dx dy dy' + \\
 & + \Omega \int K'_{pp}(x, y/0) \frac{\partial \phi(y-y')}{\partial y'_k} \rho^{(p)}(y') 2i \sin\{k(y'-x)\} dx dy dy' = \\
 & = A_{ppk} \cdot k + B_{ppk} \cdot \Omega, \quad \partial \partial c
 \end{aligned}$$

$$A_{ppk} = 2i \int K_{pp}(x, y/0) \frac{\partial \phi(y-y')}{\partial y'_k} \rho^{(p)}(y') \cdot (y'-x) dx dy dy',$$

$$B_{ppk} = 2 \int K'_{pp}(x, y/0) \frac{\partial \phi(y-y')}{\partial y'_k} \rho^{(p)}(y') dx dy dy'.$$

$$K'_{pp}(x, y/0) = \frac{\partial K_{pp}(x, y/\Omega)}{\partial \Omega} \Big|_{\Omega=0}.$$

Система трех уравнений (23) с учетом введенных обозначений принимает вид

$$\Omega^2 C_\alpha + \frac{1}{m^2} \sum_{(\beta, \gamma)} i k_\beta C_\gamma \{ A_{\alpha\beta\gamma} \cdot k + B_{\alpha\beta\gamma} \Omega \} +$$

$$+ \frac{1}{m} k^2 \sum_{(\beta)} C_\beta D_{\alpha\beta} = \frac{k_\alpha + G_\alpha}{m} \rho_\alpha^{(0)} \delta c, \quad (k \rightarrow 0, \Omega \rightarrow 0), \quad (24)$$

здесь

$$D_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2} \int \frac{\partial^2 \phi(x-x')}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \rho^{(0)}(x) \rho^{(0)}(x') (x-x')^2 dx dx'$$

Система уравнений (24) определяет спектр коллективных колебаний акустического типа.

Полагая в уравнениях (24) $\Omega=0$ и используя определение (14) для функции Грина типа "плотность-плотность" $\llcorner \rho_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') \gg_{\Omega=0}$, получаем, что при $k \rightarrow 0$ эта функция имеет особенность вида $\frac{1}{k^2}$. Такая особенность у функции Грина указанного типа для кристалла была получена нами на основе строгих неравенств для корреляционных функций и функций Грина [9]. Этот результат указывает, в частности, на отсутствие кристаллического упорядочения в одно- и двумерных системах [10].

§5.

Проиллюстрируем полученные результаты на примере приближения, знающего приближению сильно связанных электронов.

Для того, чтобы конкретизировать входящие в уравнения величины $\rho^{(0)}(x)$ и $K_{\alpha\beta}(x, y; \Omega)$, заметим, что функции $\psi_i(x)$ представляют собой собственные функции одночастичной задачи

$$\left\{ -\frac{1}{2m} \Delta_x + U^{(0)}(x) \right\} \psi_i(x) = E_i \psi_i(x), \quad (25)$$

а самосогласованный потенциал $U^{(0)}(x)$ как периодическая функция может быть представлен в виде

$$U^{(0)}(x) = \sum_n V_n \delta(x - \vec{r}_n), \quad (26)$$

где \vec{r}_n - координаты узлов решетки, $V_n \delta(x - \vec{r}_n)$ - некоторая функция, которая в простейшем случае, когда $\psi_i(x) = \sum_n \delta(x - \vec{r}_n)$, представляет собой

потенциал явного взаимодействия $\Phi(x)$:

$$U^{(0)}(x) = \int \Phi(x-x') \rho^{(0)}(x') dx' = \sum_n \Phi(x-x_n).$$

в нашем приближении мы будем полагать, что функция $\varphi_k(x)$ ($\nu = \vec{k}, \lambda$) может быть представлена в виде

$$\varphi_{k,\lambda}(x) = \sum_n e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x}_n)} \psi_\lambda(\vec{x} - \vec{x}_n), \quad (27)$$

где $\psi_\lambda(\vec{x} - \vec{x}_n)$ есть собственная функция уравнения

$$\left\{ \frac{1}{2m} \Delta_x + W(\vec{x} - \vec{x}_n) \right\} \psi_\lambda(\vec{x} - \vec{x}_n) = \epsilon_\lambda \psi_\lambda(\vec{x} - \vec{x}_n).$$

Поскольку можно считать, что в кристалле отклонения атомов от своих равновесных положений невелики, существенным является вид потенциала вблизи точек минимума, где он может быть приближенно представлен как

$$U^{(0)}(\vec{x}) = \text{const.} + \sum_n \frac{m\omega^2}{2} (\vec{x} - \vec{x}_n)^2.$$

Если рассмотреть расщепление в периодическом поле только самого нижнего уровня $\epsilon_{\lambda=0}$, которому соответствует волновая функция $\psi_0(x-x_n) = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2}(\vec{x}-\vec{x}_n)^2}$, т.е. считать, что в блоховской сумме

(27) индекс λ принимает одно значение $\lambda=0$, и волновая функция кристалла может быть представлена в виде

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/4} \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}_n - \frac{m\omega}{2}(\vec{x}-\vec{x}_n)^2}, \quad (28)$$

то такое приближение можно назвать "однозонным".

дисперсионная зависимость энергии E как функции квазиимпульса определяется в соответствии с обычной схемой приближения сильной связи:

$$E_k = E_0 + \sum_{(n,m, \vec{x}_m \neq 0)} \cos \vec{k} \cdot \vec{x}_m \int dx W(\vec{x} - \vec{x}_n) \psi_0^*(\vec{x}) \psi_0(\vec{x} - \vec{x}_m).$$

для близких значений квазиимпульса \vec{q} и $\vec{q} + \vec{k}$ ($k \rightarrow 0$), разность $E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{q}}$ имеет порядок k :

$$E_{\vec{q}+\vec{k}} - E_{\vec{q}} = -2 \sum_{(\vec{\delta})} \sin \frac{\vec{k} \cdot \vec{\delta}}{2} \sin(\vec{q} - \frac{\vec{k} \cdot \vec{\delta}}{2}) \sum_{(n,\delta)} \int dx W(x-x_n) \psi_0(x) \psi_0(x-\delta), \quad (29)$$

где $\vec{\delta}$ - совокупность векторов ближайших соседей, перекрытия вол-

новых функций, относящихся к узлам, не являющимися ближайшими соседями, не учитываются.

Нетрудно получить в нашем приближении величины $\rho^{(0)}(\vec{x})$; следует, однако, заметить, что поскольку вид $g(\vec{x})$ зависит от $\rho^{(0)}(\vec{x})$ (через $U^{(0)}(\vec{x})$), соответствующие приближения должны быть согласованы. Поэтому в дальнейшем будем полагать

$$\rho^{(0)}(\vec{x}) = \sum_n d_n \delta(\vec{x} - \vec{x}_n), \quad (20)$$

(оставляя все температурную зависимость в выражении $K_{\alpha\beta}(xy|\Omega)$):

$$K_{\alpha\beta}(xy|\Omega) = \frac{1}{4N^2} \left(\frac{m\omega}{\pi} \right)^2 \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{W_{\vec{k}} - W_{\vec{k}'}}{\Omega + E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}} \cdot \left\{ 2m\omega \delta_{\alpha\beta} + (m\omega)^2 (\vec{x}_n - \vec{x}_{n'}) (\vec{x}_{n''} - \vec{x}_{n'''}) \right\}. \quad (21)$$

Опуская в правой части уравнения (23) источники, принимая во внимание (30), а также периодичность ядра $K_{\alpha\beta}(x, y|\Omega)$ (по аргументу $\frac{\vec{x} - \vec{y}}{a}$):

$$K_{\alpha\beta}(\vec{x} + \vec{x}_n, \vec{y} + \vec{x}_n|\Omega) = K_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{y}|\Omega).$$

получаем уравнения для C_α вида:

$$\Omega^2 C_\alpha - \frac{1}{m^2} \sum_{(k, \vec{y})} C_\beta (ik_\beta) \iint K_{\alpha\beta}(xy|\Omega) \frac{\partial \Phi(\vec{y})}{\partial y_\beta} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x})} dx dy + \frac{1}{m} \sum_{(k)} C_\alpha \sum_n \frac{\partial^2 \Phi(\vec{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \Big|_{\vec{x}, \vec{x}_n} \cdot \left\{ -2 \sin^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{x}_n}{2} \right\} = 0. \quad (22)$$

для интеграла во втором члене левой части этого уравнения

в рамках нашего приближения следует выражение:

$$\begin{aligned} & \iint K_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{y}|\Omega) \frac{\partial \Phi(\vec{y})}{\partial y_\beta} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x})} dx dy = \\ & = \frac{1}{4N} \left(\frac{m\omega}{\pi} \right)^2 \sum_{\vec{k}} \frac{W_{\vec{k}} - W_{\vec{k}'}}{\Omega + E_{\vec{k}}} - \left[dx e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \sum_{\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{y})} \delta_{\alpha\beta} \cdot \frac{m\omega}{\Omega + E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}'}} \right] \left[\sum_{\vec{k}''} m\omega^2 (\delta_{\alpha\beta} + \vec{k}'' \cdot \vec{k}'') \right] \\ & - 2m\omega^2 \delta_{\alpha\beta} \left[dy e^{-i\vec{k} \cdot \vec{y}} \Phi_{\vec{k}}(ik_\beta) \sum_{\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{y})} \delta_{\alpha\beta} \cdot \frac{m\omega}{\Omega + E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}'}} \right] \end{aligned} \quad (23)$$

Мы интересуемся случаем малых k и сохраняем в интеграле

только члены первого порядка по k . Суммирование по $\vec{\delta}$ представим в виде $\sum_{\lambda} f(\vec{\delta}_{\lambda})$, где индекс λ у векторов $\vec{\delta}$ принимает значения $\pm 1, \pm 2, \pm 3$, причем $\vec{\delta}_{x1} = \pm a \vec{e}_x$, $\vec{\delta}_{x2} = \pm a \vec{e}_y$, $\vec{\delta}_{x3} = \pm a \vec{e}_z$.

выражение (33) принимает вид ($\Phi_0 = \int \Phi_{(x)} dx$):

$$\frac{f}{4} \frac{(m\omega)^4}{\pi^2} (k_y) \frac{\Phi_0}{V} \sum_{(\lambda, \lambda')} W'(E_{\lambda}) \left(1 - \frac{\Omega}{c_y k}\right) C_{\lambda} \sum_{(\lambda, \lambda')} (-2 + m\omega a^2 \delta_{(\lambda, \lambda')}) \cdot e^{-i\vec{\delta}(\vec{\delta}_{\lambda} - \vec{\delta}_{\lambda'})} \int dx^2 dy^2 e^{-\frac{m\omega}{2} [x^2 + (\bar{x} - \vec{\delta}_{\lambda})^2 + y^2 + (\bar{y} - \vec{\delta}_{\lambda'})^2]}$$

где $C_{\lambda} = \frac{a E_{\lambda}}{2q}$; $W'(E_{\lambda}) = \frac{\partial W'(E_{\lambda})}{\partial E_{\lambda}}$.

Подставляя это выражение в уравнение (32), принимая во внимание, что $\frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x_m \partial x_n} = m\omega^2 \delta_{mn}$ и приближенно заменяя при малых k $\sum_{\lambda} \sin^2 \frac{k \cdot \lambda}{2} = \sum_{\lambda} \sin^2 \frac{a k_{\lambda}}{2} \approx \frac{1}{2} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) a^2 = \frac{(ka)^2}{2}$, получим:

$$\Omega^2 C_a - \omega^2 k^2 a^2 C_a + \frac{f}{4} \frac{m^2 \omega^6}{\pi^2} \frac{\Phi_0}{V} \sum_{(\lambda)} C_{\lambda} k_{\lambda} k_{\lambda} \cdot \sum_{(\lambda, \lambda')} W'(E_{\lambda}) \left(1 - \frac{\Omega}{c_y k}\right) \sum_{(\lambda, \lambda')} (-2 + m\omega a^2 \delta_{(\lambda, \lambda')}) e^{-i\vec{\delta}(\vec{\delta}_{\lambda} - \vec{\delta}_{\lambda'})} \int dx^2 dy^2 e^{-\frac{m\omega}{2} [x^2 + (\bar{x} - \vec{\delta}_{\lambda})^2 + y^2 + (\bar{y} - \vec{\delta}_{\lambda'})^2]} = 0. \quad (34)$$

Равенство нулю детерминанта системы (34) определяет спектр коллективных колебаний акустического характера, а полученные в рамках используемого приближения функции Грина вида $\langle \rho_{k, \vec{\delta}}^{\rho} \rho_{-\vec{\delta}, -z}^{\rho} \rangle_{\Omega, \tau}$ удовлетворяют теореме Н.Н.Боголюбова об особенностях типа $\frac{1}{k^2}$.

В заключение приношу глубокую благодарность академику Н.Н.Боголюбову за внимание к работе и ценные советы и указания.

Литература:

1. Н.Н. Боголюбов, Учен 67, 549 (1959).
2. В.Г. Соловьев, сб. "Проблемы теоретической физики", "наука", Москва, 1969.
3. В.Л. Садовников, Международная конференция по теории плазмы, тезисы доклада, Киев, 1971.
4. Н.Н. Боголюбов, избранные труды, т. 1, "наукова думка", Киев, 1971.
5. Н.Н. Боголюбов (мл), В.И. Садовников, вестник МГУ, 41, (1962)
6. Н.Н. Боголюбов (мл), В.И. Садовников, вестник МГУ, 42, (1963).
7. Н.Н. Боголюбов, избранные труды, т. 2, "Наукова думка", Киев, 1971.
8. Л.И. Вазаров, вестник МГУ, 4, (1965).
9. В.И. Садовников, В.И. Сорокина. ДАН СССР, 188, 788 (1969).
10. В.И. Sadovnikov, E.M. Sorokina. Int. Journ. Pure and Appl. Phys., 8, 61, (1970).

Рукопись поступила в издательский отдел
2 августа 1973 года.