Журнал технической физики, 2011, том 81, вып. 4

Краткие сообщения

01

Теория возмущений для мацубаровской функции Грина с гамильтонианом однопримесной задачи. Уравнение Дайсона

© А.М. Сарры, М.Ф. Сарры

Российской федеральной ядерный центр
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
Институт теоретической и математической физики,
607189 Саров, Нижегородская область, Россия
e-mail: sarry@vniief.ru

(Поступило в Редакцию 17 марта 2010 г.)

Предложен метод вычисления термодинамической (мацубаровской) функции Грина для гамильтониана Хаббарда в применении к однопримесной задаче. В этой задаче имеют место всего четыре состояния, что и делает возможным это решение.

Введение

В работе [1] построено динамическое среднее поле для экзотически [2] усредненного гамильтониана Хаббарда. В работе [1] *точно* вычислены все термодинамические функции однопримесной задачи, получены *точные* выражения для запаздывающей и опережающей функций Грина (ФГ) этой задачи. Все это стало возможным благодаря *точной* линеаризации (по возмущению) экспоненты от возмущающей части H'_j однопримесного гамильтонина

$$H_j = H'_j + H^0_j : \exp(\pm\beta H'_j)$$

$$= \mathrm{ch}(\sqrt{\lambda}\beta) \pm \lambda^{-1/2}\,\mathrm{sh}(\sqrt{\lambda}\beta)H'_j,$$

$$\lambda \equiv a_1a_2 + a_3a_4$$

путем удачной перестройки бесконечных рядов.

В настоящей работе показано, как *точно* вычислить мацубаровскую ФГ этой однопримесной задачи с помощью *теории возмущений*, воспользовавшись тем, что эта задача имеет *конечное* число (четыре) состояний.

Из определения мацубаровской ($\equiv$ термодинамической) ФГ непосредственно видно, что они зависят только от разности мнимых времен $it \equiv \tau$:

$$\begin{aligned} G_j^{\mathrm{Matsub}}(\tau'', \tau') &\equiv -i\langle T[\hat{\Psi}_j(\tau'')\hat{\Psi}_j^+(\tau')]\rangle \\ &\equiv -i\mathrm{sp}\{e^{-\beta(H-\Omega-\mu\hat{N})}T[\hat{\Psi}_j(\tau'')\hat{\Psi}_j^+(\tau')]\} \\ &= -i\mathrm{sp}\{e^{-\beta(H-\Omega-\mu\hat{N})}T[e^{(H-\mu\hat{N})(\tau''-\tau')} \\ &\times \hat{\Psi}_j e^{-(H-\mu\hat{N})(\tau''-\tau')}\hat{\Psi}_j^+]\} = G_j^{\mathrm{Matsub}}(\tau''-\tau'). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь использовано свойство следа от произведения операторов под его знаком не менять своего значения при их циклической перестановке (например, $\mathrm{sp}(\hat{1}\hat{2}\hat{3}) = \mathrm{sp}(\hat{3}\hat{1}\hat{2}) = \mathrm{sp}(\hat{2}\hat{3}\hat{1})$) и гезенберговское представление „временной“ зависимости операторов $\hat{\Psi}_j^{\pm}(\tau)$:

$$\hat{\Psi}_j^{\pm}(\tau) = \hat{\Psi}_j^{\pm}(\tau) = e^{\tau(H-\mu\hat{N})}\hat{\Psi}_j^{\pm}e^{-\tau(H-\mu\hat{N})}. \quad (2)$$

Координатная зависимость этих операторов в данной задаче сводится лишь к указанию номера j рассматриваемого узла решетки. В гиббсовском множителе $e^{-\beta(H-\Omega-\mu\hat{N})}$ фигурирует термодинамический потенциал Ω в переменных T, V, μ. Его дифференциал в этих переменных имеет вид $d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu$.

1. Гамильтониан однопримесной задачи и его состояния

Гамильтониан этой задачи имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H_j = (H'_j) + [H^0_j] &= zt_{(jj')}(\langle\hat{C}_{j\uparrow}\rangle\hat{C}^+_{j\uparrow} + \langle\hat{C}^+_{j\uparrow}\rangle\hat{C}_{j\uparrow} \\ &+ \langle\hat{C}_{j\downarrow}\rangle C^+_{j\downarrow} + \langle\hat{C}^+_{j\downarrow}\rangle\hat{C}_{j\downarrow}) + [U\hat{n}_\uparrow\hat{n}_\downarrow - \mu(\hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow)] \\ &\equiv (a_1\hat{C}^+_{j\uparrow} + a_2\hat{C}_{j\uparrow} + a_3\hat{C}^+_{j\downarrow} + a_4\hat{C}_{j\downarrow}) \\ &+ [U\hat{n}_\uparrow\hat{n}_\downarrow - \mu(\hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow)]. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь z — число ближайших соседей узла j, а $t_{(jj')} \equiv t$ — энергия перескока электрона с узла j на ближайший ему соседний узел. Четыре двухэлектронные состояния узла, описываемые гамильтонианом H_j, таковы:

$$u_1 = |0_\uparrow 0_\downarrow\rangle, \quad u_2 = |1_\uparrow 0_\downarrow\rangle, \quad u_3 = |0_\uparrow 1_\downarrow\rangle, \quad u_4 = |1_\uparrow 1_\downarrow\rangle. \quad (4)$$

Действие отдельных частей гамильтониана (3) на эти состояния:

$$H'_j|u_1\rangle = a_1|u_2\rangle + a_3|u_3\rangle; \quad H^0_j|u_1\rangle = 0;$$

$$H'_j|u_2\rangle = a_2|u_1\rangle + a_3|u_4\rangle; \quad H^0_j|u_2\rangle = -\mu|u_2\rangle;$$

$$H'_j|u_3\rangle = a_1|u_4\rangle + a_4|u_1\rangle; \quad H^0_j|u_3\rangle = -\mu|u_3\rangle;$$

$$H'_j|u_4\rangle = a_2|u_3\rangle + a_4|u_2\rangle; \quad H^0_j|u_4\rangle = (U-2\mu)|u_4\rangle,$$

т. е.

$$H^0_j|u_k\rangle = E_k|u_k\rangle. \tag{5}$$

Имея в виду лишь разностную зависимость рассматриваемой ФГ от мнимого времени, можно сразу определить фурье-образ ФГ по этой разности $\tau'' - \tau' \equiv \tau$ [3]:

$$G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n) = \int\limits_0^\beta e^{i\omega_n\tau} G^{\text{Mat}}_{j\pm}(\tau)d\tau, \tag{6}$$

где

$$\begin{cases} \omega_n = (2n+1)\pi/\beta \text{ — для фермионов} \\ \omega_n = 2n\pi/\beta \text{ — для бозонов.} \end{cases}$$

Определяющее уравнение для $G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)$ можно записать в виде

$$(i\omega_n - H_j \mp i\varepsilon)G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n) = 1. \tag{7}$$

Теперь используется полная и ортонормированная система $\{u_k\}$ двухэлектронных состояний u_k узла j, где $k = 1, 2, 3, 4$. Взяв матричный элемент от уравнения (7) между состояниями $u_{k'}$ и u_k узла j и вставив единицу $\Sigma_{k''}|u_{k''}\rangle\langle u_{k''}|$ между круглой скобкой и ФГ, легко получить выражение

$$\Sigma_{k''}\langle u_{k'}|(i\omega_n - H_j \mp i\varepsilon)\Sigma_{k''}|u_{k''}\rangle\langle u_{k''}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle$$
$$= \langle u_{k'}||u_k\rangle = \delta_{kk'}, \tag{8}$$

пригодное для использования теории возмущений по возмущающей части H'_j полного гамильтониана узла H_j:

$$\Sigma_{k''}\langle u_{k'}|i\omega_n - H^0_j \mp i\varepsilon|u_{k''}\rangle\langle u_{k''}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle$$
$$- \Sigma_{k''}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle\langle u_{k''}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle = \delta_{kk'}$$

или

$$(i\omega_n - E_k \mp i\varepsilon)\langle u_{k'}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle$$
$$- \Sigma_{k''}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle\langle u_{k''}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle = \delta_{kk'}. \tag{9}$$

Это уравнение позволяет систематически и последовательно строить нужные поправки по возмущению. Если возмущения нет, то невозмущенная ($\equiv$ нулевая) ФГ есть

$$\langle u_{k'}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle|_{H'_j=0} = \delta_{kk'}/(i\omega_n - E_k \mp i\varepsilon)$$
$$= G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\delta_{kk'}. \tag{10}$$

Малые добавки ($\mp i\varepsilon$) относятся к опережающей ФГ ($-i\varepsilon$) и запаздывающей ФГ ($+i\varepsilon$).

2. Ряд теории возмущений для мацубаровской ФГ

Из уравнения (9), записанного в более удобном виде

$$G^{\text{Mat}}_{jk'k\pm}(i\omega_n) = G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\delta_{kk'} + G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)$$
$$\times \Sigma_{k''}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle\langle u_{k''}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle, \tag{11}$$

методом последовательных подстановок (он отличается от метода последовательных приближений тем, что во втором случае первое приближение может быть произвольным) легко получить разложение матричного элемента

$$\langle u_{k'}|G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle \equiv G^{\text{Mat}}_{jk'k\pm}(i\omega_n)$$

исходной ФГ $G^{\text{Mat}}_{j\pm}(i\omega_n)$ по возмущению H'_j:

$$G^{\text{Mat}}_{jk'k\pm}(i\omega_n)|_{H'_j=0} = G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)d_{k'k}, \tag{12}$$

$$G^{\text{Mat}\,\text{I}}_{jk'k\pm}(i\omega_n) = G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\delta_{k'k} + G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)$$
$$\times \Sigma_{k''}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle\langle u_{k''}|G^{\text{Mat}\,0}_{j\pm}(i\omega_n)|u_k\rangle$$
$$= G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\delta_{k'k} + G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\langle u_{k'}|H'_j|u_k\rangle G^{\text{Mat}\,0}_{jk\pm}(i\omega_n), \tag{13}$$

$$G^{\text{Mat}\,\text{II}}_{jk'k\pm}(i\omega_n) = G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\delta_{k'k} + G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)$$
$$\times \Sigma_{k''}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle G^{\text{Mat}\,\text{I}}_{jk''k\pm}(i\omega_n) = G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\delta_{k'k}$$
$$+ G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\langle u_{k'}|H'_j|u_k\rangle G^{\text{Mat}\,0}_{jk\pm}(i\omega_n) + G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)$$
$$\times \Sigma_{k''}\langle u_{k'}|H'|u_{k''}\rangle G^{\text{Mat}\,0}_{jk''\pm}\langle u_{k''}|H'|u_k\rangle G^{\text{Mat}\ 0}_{jk\pm}, \tag{14}$$

$$G^{\text{Mat}\,\text{III}}_{jk'k\pm}(i\omega_n) = G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\delta_{k'k} + G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)$$
$$\times \Sigma_{k''}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle G^{\text{Mat}\,\text{II}}_{jk''k\pm}(i\omega_n) = G^{\text{Mat}\,\text{II}}_{jk'k\pm}(i\omega_n)$$
$$+ G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}(i\omega_n)\Sigma_{k''k'''}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle$$
$$\times G^{\text{Mat}\,0}_{jk''\pm}\langle u_{k''}|H'_j|u_{k'''}\rangle G^{\text{Mat}\,0}_{jk'''\pm}\langle u_{k'''}|H'_j|u_k\rangle G^{\text{Mat}\,0}_{jk\pm}. \tag{15}$$

3. Уравнение Дайсона

Теперь удобно ввести определение некоторой новой функции $\bar{\Sigma}_k(i\omega_n)$ — так называемой собственно энергетической части ФГ — и ее разложение:

$$\bar{\Sigma}_k(i\omega_n) = \langle u_k|H'_j|u_k\rangle + \Sigma_{k'(k'\neq k)}\langle u_k|H'_j|u_{k'}\rangle$$
$$\times G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}\langle u_{k'}|H'_j|u_k\rangle + \Sigma_{k'k''(k',k''\neq k)}\langle u_k|H'_j|u_{k'}\rangle$$
$$\times G^{\text{Mat}\,0}_{jk'\pm}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle G^{\text{Mat}\,0}_{jk''\pm}\langle u_{k''}|H'_j|u_k\rangle + \ldots. \tag{16}$$

Тогда диагональные части ФГ (13)–(15) можно будет представить в виде выражения

$$G^{\text{Mat}}_{jkk\pm}(i\omega_n) = 1/[i\omega_n - E_k \mp i\varepsilon - \bar{\Sigma}_k(i\omega_n)], \tag{17}$$

известного в литературе как уравнение Дайсона. Справедливость этого выражения можно показать чисто формальными преобразованиями:

$$G^{\mathrm{Mat}}_{jkk\pm} \equiv [1/(i\omega_n - E_k \mp i\varepsilon)]$$
$$\times \{1/[1 - \bar{\Sigma}_k(i\omega_n)/(i\omega_n - E_k \mp i\varepsilon)]\}$$
$$= G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk\pm}[1 + \bar{\Sigma}_k G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk\pm} + (\bar{\Sigma}_k G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk\pm})^2 + \ldots], \qquad (18)$$

если считать $0 \le \bar{\Sigma}_k(i\omega_n)/(i\omega_n - E_k \mp i\varepsilon) < 1$, и потому пользоваться разложением геометрической прогрессии (разложения физических величин почти никогда не являются сходящимися рядами — наоборот, они почти всегда являются асимптотическими рядами). Из разложения (18), взято в определенном приближении по возмущению, можно видеть, что оно будет совпадать с диагональной частью соответствующего приближения из выражений (13)–(15).

Уравнение Дайсона (17) дает значительные вычислительные преимущества, поскольку если функцию $\bar{\Sigma}_k(i\omega_n)$ вычислить даже лишь в первом порядке по H'_j и подставить полученное выражение для $\bar{\Sigma}^I_k(i\omega_n)$ в уравнение (17), то можно будет увидеть, что это будет означать выполнение суммирования некоторых членов разложения для ФГ во всех порядках по H'_j. На языке диаграммной техники это означает суммирование некоторой бесконечной подпоследовательности диаграмм. В этом и состоит практическая польза использования в вычислениях уравнения Дайсона. В рассматриваемом случае одноприместной задачи, как показано ниже, эта собственно энергетическая часть $\bar{\Sigma}_k(i\omega_n)$ вычисляется *точно*, а потому и ФГ вычисляется *точно* с помощью Дайсона.

4. Аналитическая схема точного решения по теории возмущений

Точное решение задачи получения ФГ одноприместной задачи для модели Хаббарда при экзотическом усреднении ее одночастичной части можно, как и отмечалось уже в [1], получить и по теории возмущений. Это связано с наличием только четырех состояний u_k рассматриваемого узла решетки, где $k = 1, 2, 3, 4$. На языке теории возмущений это означает, что обычно бесконечный ряд (16) в данном случае оборвется сам собой, уже на члене четвертого порядка по H'_j, поскольку имеются только три промежуточных состояния. Этот, четвертый, член имеет следующий вид:

$$\Sigma_{k'k''k'''(k',k'',k'''\neq k)}\langle u_k|H'_j|u_{k'}\rangle G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk'\pm}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle$$
$$\times G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk''\pm}\langle u_{k''}|H'_j|u_{k'''}\rangle G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk'''\pm}\langle u_{k'''}|H'_j|u_k\rangle. \qquad (19)$$

Поскольку возмущение имеет явный вид, первый член разложения (16) выпадает, так как оно не имеет диагональных матричных элементов. Во всех других матричных элементах остаются только недиагональные. Это приводит к тому, что полное разложение (16) в данной задаче состоит всего из двух членов — второго и четвертого порядка, поскольку поправка третьего порядка также обращается в нуль. Поэтому даже полное разложение (16) для данной задачи можно записать очень кратко:

$$\bar{\Sigma}_{jk}(i\omega_n) = \Sigma_{k'(k'\neq k)}\langle u_k|H'_j|u_{k'}\rangle G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk'\pm}\langle u_{k'}|H'_j|u_k\rangle$$
$$+ \Sigma_{k'k''k'''(k',k'',k'''\neq k)}\langle u_k|H'_j|u_{k'}\rangle G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk'\pm}\langle u_{k'}|H'_j|u_{k''}\rangle$$
$$\times G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk''\pm}\langle u_{k''}|H'_j|u_{k'''}\rangle G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk'''\pm}\langle u_{k'''}|H'_j|u_k\rangle. \qquad (20)$$

Фигурирующие здесь матричные элементы вычисляются довольно легко, если использовать равенства (5). Результаты этих вычислений таковы:

$$\langle k_1|\bar{\Sigma}_j(i\omega_n)|k_1\rangle \equiv \bar{\Sigma}_{jk_1k_1}(i\omega_n)$$
$$= [a_1a_2G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_2\pm} + a_3a_4G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_3\pm}]^{\mathrm{II}} + [\ldots]^{\mathrm{IV}}, \qquad (21)$$

где явный вид поправки четвертого порядка дается выражением

$$[\ldots]^{\mathrm{IV}} = [a_1a_2(a_1a_2G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_2\pm} + a_3a_4G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_3\pm})G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_1\pm}G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_2\pm}$$
$$+ a_1a_2a_3a_4(G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_2\pm} + G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_3\pm})G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_2\pm}G^{\mathrm{Mat}\,0}_{jk_4\pm}]^{\mathrm{IV}}. \qquad (22)$$

Список литературы

[1] *Сарры А.М., Сарры М.Ф.* // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 6. С. 10–15.

[2] *Caron L., Pratt G.* // Rev. Mod. Phys. 1968. Vol. 40. N 4. P. 802.

[3] *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962. 446 с.