

Диаграммная техника

Диаграммное разложение является мощным методом для получения разнообразной информации о системах взаимодействующих частиц в квантовой теории поля и в статистической физике. В наносистемах электронные процессы могут характеризоваться сильными локальными взаимодействиями во внутренней области нанообъектов и корреляционными эффектами между разными фазами и подструктурами. В настоящее время прослеживается тенденция перехода от уровня частиц сильно взаимодействующих систем к кластерному уровню. Кластерное приближение дает возможность описать внутреннюю динамику кластера, описываемую группой Ли, и определить локальные корреляции с большей точностью. В связи с этим, для изучения наносистем и сильнокоррелированных систем возникает необходимость обобщения диаграммной техники Фейнмана на квантовые системы с произвольной внутренней Ли-групповой динамикой. Используя диаграммную технику, можно найти спектры квазичастичных возбуждений, вычислить вероятности переходов, определить температурные зависимости термодинамических потенциалов, найти параметры релаксации возбуждений. Построение диаграммной техники, которая описывает модели с произвольной внутренней Ли-групповой динамикой и учитывает топологию квантовых систем, проведено в [1, 2].

В общем виде гамильтониан с билинейной формой взаимодействия имеет вид

$$H = \sum_{\vec{1}, j} [b_j(\vec{1}) + p_j(\vec{1})] \sigma_j(\vec{1}) + \sum_{\vec{1}, 2, i, j} V_{ij}(\vec{1} - \vec{2}) \sigma_i(\vec{1}) \sigma_j(\vec{2}), \quad (1)$$

где $b_j(\vec{1})$ - внешние поля, $p_j(\vec{1})$ - вспомогательные поля, устремляемые к нулю при вычислении функций Грина, $V_{ij}(\vec{1} - \vec{2})$ - взаимодействие, $\vec{1} \equiv \vec{r}_1, \vec{2} \equiv \vec{r}_2$ - упрощенное обозначение положения кластера. Операторы $\sigma_j(\vec{1})$ характеризуют различные свойства квантовых систем и могут быть операторами энергии определенного уровня, спиновыми операторами, операторами числа частиц, операторами электрического дипольного момента и т.п. Поля $b_j(\vec{1})$, соответствующие этим операторам, есть величины энергий, магнитных полей, химических потенциалов, электрических полей. Операторы $\sigma_j(\vec{1})$ удовлетворяют коммутационным соотношениям $[\sigma_i(\vec{1}), \sigma_j(\vec{2})]_{\pm} = \sum_m C_{ij}^m \sigma_m(\vec{1}) \delta_{\vec{1}\vec{2}}$ и определяют алгебру (супералгебру) Ли L на узле $\vec{1}$. Алгебра (супералгебра) Ли L задает внутреннюю Ли-групповую динамику квантовой системы.

Для Бозе и Ферми систем внутренняя динамика проста и дается, соответственно, группой и супергруппой Гейзенберга-Вейля. Соответствующие алгебры Ли (алгебра и супералгебра Гейзенберга) образованы операторами рождения и уничтожения.

В модели Гейзенберга внутренняя динамика спиновой системы описывается группой Ли $Spin(3)$. Соответствующая ей алгебра Ли $so(3)$ натянута на спиновые операторы.

В случае модели Хаббарда внутренняя динамика определяется супергруппой с супералгеброй Ли $sl(2,2)$.

Модель, описывающая системы с антиферромагнетизмом и сверхпроводимостью, представленная в [Demler E., Hanke W., Zhang S.-C., *Rev. Mod. Phys.* 2004, **76**, 909], имеет динамическую группу $SO(5)$.

Внутренняя динамика модели спиновой системы с одноосной анизотропией описывается алгеброй Ли $sl(3)$.

Эволюция квантовой системы (1) вблизи термодинамического равновесия описывается эволюционными операторными уравнениями

$$\frac{\partial \mathcal{E}_j(\vec{1}, \tau)}{\partial \tau} = [H, \mathcal{E}_j(\vec{1}, \tau)], \quad (2)$$

где $\mathcal{E}_j(\vec{1}, \tau) = \exp(\tau H) \sigma_j(\vec{1}) \exp(-\tau H)$ - операторы в евклидовом представлении Гейзенберга и τ - независимая переменная, описывающая эволюцию. Для построения диаграммной техники определен производящий функционал $Z[p]$ температурных функций Грина и в эволюционных уравнениях (2) осуществлен переход к дифференциальному представлению операторов квантовой системы - к дифференциальным операторам над коммутативной алгеброй регулярных функционалов, определенных над кольцом функций внешних полей $p_j(\vec{1}, \tau)$. Решения получившихся дифференциальных функциональных уравнений для производящего функционала $Z[p]$ ищутся в форме степенных рядов относительно взаимодействий V_{ij} и полей $p_j(\vec{1}, \tau)$. Каждый член ряда соответствует диаграмме, вследствие чего это разложение в виде ряда называется диаграммным разложением. Решения находятся в два этапа: на первом этапе определяется производящий функционал без взаимодействий V_{ij} и на втором этапе - функционал $Z[p]$. После выделения подалгебры Картана алгебры L найдена рекуррентная процедура, позволившая построить диаграммы. Диаграммы состоят из пропагаторов, линий взаимодействия, вершин, соединяющих пропагаторы и линии взаимодействия, и блоков, объединяющих пропагаторы и вершины (рис. 1). Аналитические выражения диаграмм, которым соответствуют аналитические выражения членов ряда разложения, определяются аналитическими выражениями и факторами составляющих их частей.

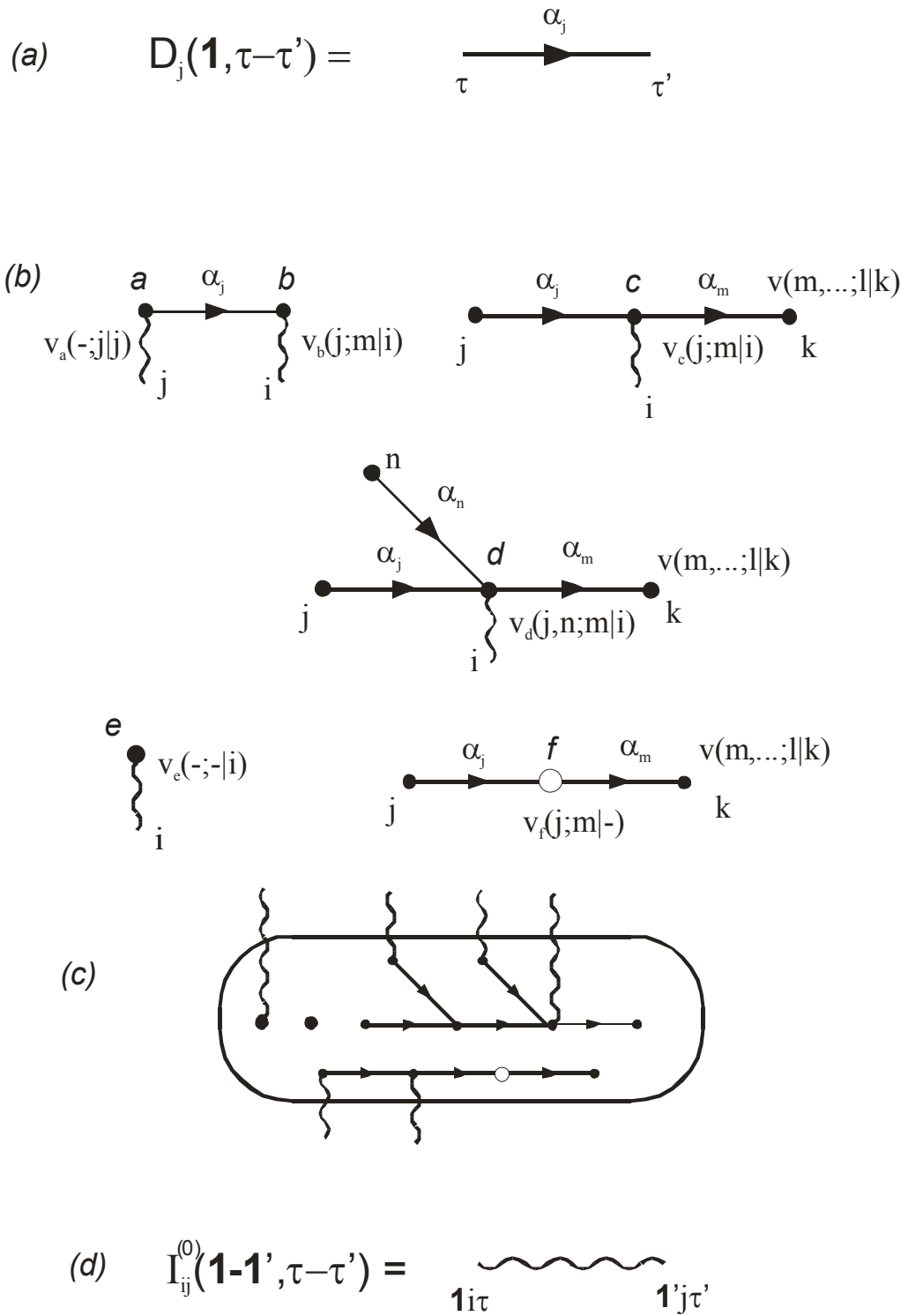


Рис. 1. (a) Пропагаторы $D_j(\vec{1}, \tau - \tau')$, (b) вершины, (c) пример блока, (d) линия взаимодействия $I_{ij}^{(0)}(\vec{1} - \vec{1}', \tau - \tau') = V_{ij}(\vec{1} - \vec{1}')\delta(\tau - \tau')$.

Данный метод построения диаграммных разложений является более общим, чем методы, использующие теорему Вика и разложение функциональных интегралов. Полученное диаграммное построение, основанное на дифференциальных функциональных уравнениях, дает возможность описать квантовые системы на топологически нетривиальных дифференцируемых

многообразиях и исследовать дифференциальные функциональные уравнения с помощью когомологий и методами вторичного дифференциального исчисления [Виноградов А.М., Красильщик И.С., Лычагин В.В., *Введение в геометрию нелинейных дифференциальных уравнений*, Наука: Москва, 1986. Vinogradov A., *Cohomological Analysis of Partial Differential Equations and Secondary Calculus*, Translations of Mathematical Monographs, vol. 204; American Mathematical Society: Providence, RI, 2001]. Для реализации этой возможности произведено обобщение дифференциальных функциональных уравнений и диаграммных разложений на случай функционалов, определенных на пучке колец функций на топологически нетривиальных многообразиях. При этом когомологические методы приобретают важность при исследовании уравнений - нетривиальные когомологии многообразия, на котором действует квантовая система, приводят к существованию дополнительных степеней свободы. В частности, на двумерной поверхности дополнительные степени свободы соответствуют вихревым возбуждениям.

Основными приближениями диаграммного разложения являются: приближение самосогласованного поля и приближение эффективных функций Грина и взаимодействий. В рамках последнего приближения введена P -матрица – матрица эффективных функций Грина и взаимодействий. P -матрица получается суммированием рядов, состоящих из затравочных взаимодействий V_{ij} и затравочных функций Грина $G_{ij}^{(0)}$, и состоит из эффективных функций Грина G_{ij} , эффективных взаимодействий I_{ij} и перекрестных членов (рис. 2). Квазичастичные возбуждения квантовой системы определяются полюсами P -матрицы.

(a)

$$G_{jn}^{(0)} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \left\{ \begin{array}{l} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \right.$$

$$(b) \quad P_{(1j)(1n)}^{(1)} = G_{jn}^{(1)} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \sum_{\gamma_1 \gamma_2} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} +$$

$$+ \sum_{\gamma_1 \dots \gamma_4} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \dots + \sum_f \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \dots =$$

$$= \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \sum_{\gamma_1 \gamma_2} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \sum_f \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

(c)

$$P_{(2j)(2n)}^{(1)} = I_{jn}^{(1)} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \sum_{\gamma_1 \gamma_2 f} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

(d)

$$P_{(1j)(2n)}^{(1)} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \sum_{\gamma} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

$$P_{(2j)(1n)}^{(1)} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \sum_{\gamma} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

Рис. 2. (a) Определение затравочных двухкоординатных функций Грина $G_{jn}^{(0)}$. (b) Определение эффективных функций Грина $P_{(1j)(1n)}^{(1)} = G_{jn}^{(1)}$ через затравочные функции Грина $G_{jn}^{(0)}$. (c) Определение эффективных линий взаимодействия $P_{(2j)(2n)}^{(1)} = I_{jn}^{(1)}$. (d) Определение перекрестных членов $P_{(1j)(2n)}^{(1)}$, $P_{(2j)(1n)}^{(1)}$. Суммирование по γ означает суммирование по индексам и пространственным переменным пропагаторов, линий взаимодействия и вершин, а суммирование по f - по индексам f -вершин.