

刘尚长 张娜 编著

Green 函数

GREENHANSUHE
LIANGZIWUZH

和

量子物质



辽宁人民出版社
辽宁科学技术出版社

ISBN 7-205-03319-5



9 787205 033194 >

ISBN 7-205-03319-5/O · 8

定价: 25.10 元

Green 函数和量子物质

刘尚长 张 娜 编著

中国图书馆书号 CIP 数据核字 (2000) 第 33841 号

责任编辑: 刘尚长 封面设计: 刘尚长
审 校: 张 娜 辽 宁 人 民 出 版 社
审 校: 张 娜 辽 宁 科 学 技 术 出 版 社

定价: 10.25 元

图书在版编目(CIP)数据

Green 函数和量子物质/刘尚长, 张娜编著. - 沈阳: 辽宁人民出版社; 辽宁科学技术出版社, 2000. 1

ISBN 7-205-03319-5

I. G… II. ①刘…②张… III. ① Green 函数②量子论
IV. 0413

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 27984 号

辽宁人民出版社 出版发行
辽宁科学技术出版社

(沈阳市和平区十一纬路 25 号 邮政编码 110003)

606 所印刷厂印刷

开本: 850 × 1168 毫米 1/32 字数: 390 千字 印张: 17%

印数: 1 - 1000 册

2000 年 1 月第 1 版

2000 年 1 月第 1 次印刷

责任编辑: 蔡文祥 刘晓娟

版式设计: 任素媛

封面设计: 杨 勇

责任校对: 刘 学

插 图: 金姗姗

定价: 25.10 元

序

物质的量子理论是当代理论物理和理论化学的一个重大成就。量子物质是普遍存在的客体。如凝聚物质,固态、液态、超流体、超导体、超磁体、输运性质、无序体系、临界现象、孤子体系等存在量子行为,可把具有量子性质和行为的物质统称为量子物质,通常用量子力学研究。集中到一点用波函数描述。自从本世纪60年代以来,Green函数理论获得了重大的发展,并在许多学科领域中得到了广泛的应用,相继取得了重大的成就。Green函数类似波函数,却包含着解释微观观测结果必不可少的信息,但是Green函数比波函数更容易为人理解,更能传递明快简洁的信息,描述量子物质经济、方便。因此,Green函数是目前研究量子物质的普遍而公认的一个理论工具。量子理论的发展,量子物质世界的揭示,Green函数理论发挥了独特的不可替代的作用,有特殊的优点和奇效。这个理论工具不能不用。

Green函数也可以称之为量子函数,用来描述量子物质。我们把本书定名为《Green函数和量子物质》。本书是在辽宁大学化学系为理学硕士研究生和相关教师开设的量子化学、高等物理化学和量子催化课程的基础上,将各相关的Green函数理论内容组织成统一体,扩展而成的。本书系统总结了Green函数在量子物质中应用的新成果,应用现代量子理论观点,表述Green函数理论及其应用的理论和典型示例,讨论

了 Green 函数的定义和性质,进而说明量子体系到量子物质,乃至外场 Green 函数自然形成的过程,取材新颖,内容充实,紧密结合典型示例,说明道理。通过本书的学习,期望不同的读者,必会得到新鲜的理论知识和计算技巧。

全书共分十三章,主要包括:Green 函数理论纲要,量子物质理论基础,量子固体,金属的输运系数,量子液体,量子气体,量子电子和声子,量子超导体,量子超磁体,量子超流体,量子无序体系,多体体系的 Green 函数,量子孤子理论。每章之后配有习题,以便加深和掌握所学内容。参考另书《Green 函数计算》。

本书面向的读者是广泛的。编著者假定读者已具备良好的量子力学和量子化学知识,及熟悉数学泛函知识。本书可作为高等学校化学和物理学科研究生、教师提高用的量子化学和量子物理学的教学参考书,也可供有关专业的科技工作者参考。

本书是一种新尝试,限于时间和水平,不当之处在所难免,恳请诸方专家和读者指正。

目 录

序.....	1
第一章 Green 函数理论纲要	1
§ 1.1 引 言	1
§ 1.2 Green 函数的定义、形式和性质	2
§ 1.2.1 定 义	2
§ 1.2.2 基本形式及性质	8
1. 基本形式	8
2. 性 质	37
§ 1.2.3 运动方程描述	39
第二章 量子物质理论基础	44
§ 2.1 引 言	44
§ 2.2 量子物质概念和特性	44
§ 2.2.1 基本概念	44
§ 2.2.2 基本特性	45
§ 2.3 量子物质的分类	46
§ 2.4 量子体系的 Green 函数	47
§ 2.4.1 引 言	47

目 录

§ 2.4.2 单体量子体系	47
1. 自由粒子情形	47
2. Green 函数和微扰理论	58
3. 紧束缚 Green 函数	77
第三章 量子固体	85
§ 3.1 引 言	85
§ 3.2 量子固体的概念和特性	85
§ 3.2.1 概 念	85
§ 3.2.2 基本特性	86
§ 3.3 量子固体的结构	88
§ 3.3.1 晶体与原子的排列	88
§ 3.3.2 金属晶体	90
§ 3.3.3 有机晶体结构	91
§ 3.4 晶格 Green 函数理论	91
§ 3.4.1 一维点阵	91
§ 3.4.2 方点阵	94
§ 3.4.3 二维点阵	99
§ 3.4.4 简单立方点阵	100
§ 3.4.5 Bethe 点阵(Cayley 树)Green 函数	104
§ 3.5 Green 函数在量子固体中的应用简评	107
第四章 金属的输运系数	109
§ 4.1 引 言	109
§ 4.2 杂质的散射效应	110
§ 4.3 电导率	120

第五章 量子液体	131
§ 5.1 引 言	131
§ 5.2 量子液体的概念和特性	131
§ 5.2.1 概 念	131
§ 5.2.2 基本特性	132
§ 5.3 量子液体的结构	134
§ 5.3.1 液体和原子排列	134
§ 5.3.2 有机液晶的结构	135
§ 5.4 液体的粘度	136
§ 5.5 正常 Fermi 液体理论	136
§ 5.5.1 正常液体	136
1. 基本假定	136
2. 有效质量	139
3. 声 速	142
4. 外场效应	144
5. 自旋磁化率	147
6. 集体振荡	148
§ 5.5.2 Fermi 液体理论的微观说明	150
§ 5.5.3 荷电 Fermi 液体	161
第六章 量子气体	165
§ 6.1 引 言	165
§ 6.2 量子气体的概念和特性	165
§ 6.2.1 概 念	165
§ 6.2.2 基本特性	166
§ 6.3 量子气体的结构	167

目 录

§ 6.3.1	量子气体分子的尺寸和形状	167
§ 6.3.2	气体和原子排列	168
§ 6.3.3	电离气体特性	168
§ 6.4	Coulomb 气 体	169
§ 6.4.1	引 言	169
§ 6.4.2	微观理论	169
§ 6.4.3	热力学势	176
§ 6.4.4	改进自具能和寿命	180
§ 6.5	高密度电子气	184
§ 6.6	稀释 Fermi 气体	191
第七章	量子电子和声子	194
§ 7.1	引 言	194
§ 7.2	量子电子	194
§ 7.2.1	引 言	194
§ 7.2.2	电子及其特性	194
§ 7.2.3	电子结构	195
§ 7.2.4	Schrödinger 方程中的电子	195
§ 7.3	量子声子	196
§ 7.3.1	概 念	196
§ 7.3.2	基本特性	197
§ 7.4	声子散射	204
§ 7.4.1	弹性散射	205
§ 7.4.2	单声子散射	206
§ 7.5	晶格的中子散射	208
§ 7.6	结构因子、Green 函数和加和规则	215
§ 7.7	金属中的电子和声子之间的相互作用	218

§ 7.8 声子微扰理论	222
§ 7.9 电子和声子相互作用的屏蔽	225
§ 7.10 Migdal 定理	228
§ 7.11 声子和电子自具能	229
第八章 量子超导体	235
§ 8.1 引 言	235
§ 8.2 量子超导体概念和特性	235
§ 8.2.1 概 念	235
§ 8.2.2 基本特性	236
§ 8.3 量子超导体的结构	237
§ 8.4 超导性的微观理论	237
§ 8.4.1 超导态的 London 理论	237
§ 8.4.2 BCS 理论	239
§ 8.5 正常态的不稳定性	244
§ 8.6 超导体热力学	248
§ 8.6.1 简单模型	248
§ 8.6.2 相互作用的完满处理	257
§ 8.7 外场效应	258
§ 8.8 杂质效应	265
§ 8.9 能隙参数相和通量量子化	272
§ 8.10 电子隧道效应	274
第九章 量子超磁体	278
§ 9.1 引 言	278
§ 9.2 量子(超导)磁体的概念和特性	278
§ 9.2.1 概 念	278

§ 9.2.2 基本特性	279
§ 9.3 量子(超导)磁体的结构	281
§ 9.3.1 引 言	281
§ 9.3.2 铁磁性	281
§ 9.3.3 顺磁性	285
§ 9.3.4 反铁磁性和亚铁磁性	287
§ 9.4 分子场论	288
§ 9.5 Green 函数近似	293
§ 9.6 Hubbard 模型	298
第十章 量子超流体	307
§ 10.1 引 言	307
§ 10.2 量子超流体的概念和性质	307
§ 10.2.1 概 念	307
§ 10.2.2 基本性质	307
§ 10.3 超流体的结构	309
§ 10.4 Bose - Einstein 凝聚	310
§ 10.5 液态氦的微观理论	311
§ 10.6 Hugenholtz - Pines 定理	318
§ 10.7 低密度 Bose 气体	321
§ 10.8 超流动性 and 环流量子化	325
第十一章 量子无序体系	328
§ 11.1 引 言	328
§ 11.2 掺杂体概念和特性	328
§ 11.2.1 概 念	328
§ 11.2.2 基本特性	329

§ 11.3 掺杂体的结构	330
§ 11.4 晶格中的单杂质	333
§ 11.5 多杂质体系	335
§ 11.6 单杂质散射	337
§ 11.6.1 引 言	337
§ 11.6.2 一般公式	338
§ 11.6.3 基本结果	346
1. 一维情形	346
2. 二维情形	348
3. 三维情形	349
§ 11.6.4 应 用	351
1. 能隙能级	351
2. Cooper 对和超导性	351
3. 电阻率和温度的关系	359
4. 含同位素杂质晶体的晶格振动	360
§ 11.7 多杂质和无序体系	362
§ 11.7.1 双杂质	363
§ 11.7.2 无限杂质数	369
1. 虚晶体近似(VCA)	371
2. 平均 t 矩阵近似(ATA)	372
3. 相干势近似(CPA)	373
4. CPA 的直接推广	375
5. CPA 的簇推广	377
§ 11.8 电导率	379
§ 11.8.1 引 言	379
§ 11.8.2 定义和一些基本结果	380
§ 11.8.3 一般电导率的公式	382

§ 11.8.4	电导率的 Green 函数理论	385
§ 11.8.5	CPA 的顶点校正	389
§ 11.8.6	CPA 外的顶点校正	393
§ 11.9	无序和定域化	394
§ 11.9.1	引 言	394
§ 11.9.2	概 述	394
§ 11.9.3	一维情形	398
§ 11.9.4	定标近似	405
§ 11.9.5	数值法	408
§ 11.9.6	Green 函数近似 I: RPE	409
§ 11.9.7	Green 函数近似 II: 顶点校正	415
第十二章	多体体系的 Green 函数	422
§ 12.1	引 言	422
§ 12.2	定 义	423
§ 12.2.1	引 言	423
§ 12.2.2	场算符表示的单粒子 Green 函数	423
§ 12.2.3	相互作用粒子的 Green 函数	429
§ 12.2.4	非相互作用粒子的 Green 函数	434
§ 12.3	Green 函数的性质和应用	438
§ 12.3.1	引 言	438
§ 12.3.2	g 和 $\bar{g}$ 的解析性质	438
§ 12.3.3	g 和 $\bar{g}$ 的物理意义和应用	443
§ 12.3.4	似粒子	450
§ 12.4	g 的计算方法	457
§ 12.4.1	引 言	457
§ 12.4.2	运行法方程	457

§ 12.4.3 计算 $T=0$ Fermion 子的图形法	463
§ 12.4.4 $T \neq 0$ 的图形法	473
§ 12.4.5 部分求和与 Dyson 方程	477
第十三章 量子孤子体系	485
§ 13.1 引 言	485
§ 13.2 量子孤子的概念和性质	485
§ 13.2.1 基本概念	485
§ 13.2.2 基本性质	486
§ 13.3 量子孤子的结构	487
§ 13.4 量子孤子和微扰	489
§ 13.4.1 引 言	489
§ 13.4.2 确定的微扰	489
1. 解析微扰理论	489
2. 数值模拟	493
3. 选择结果、解释和应用	493
§ 13.4.3 经典统计力学	498
§ 13.5 多孤子微扰理论	499
§ 13.5.1 引 言	499
§ 13.5.2 力能学解析	501
§ 13.5.3 微扰方案简介	504
§ 13.5.4 单磁通量子的微扰分析	509
1. 一般动力学方程	509
2. 微程锁定	513
3. 量子通量梭	516
§ 13.5.5 磁通量子相互作用	518
1. 磁通量子 and 反磁通量子碰撞	518

目 录

2. 脉动衰减	521
3. 通量束	523
§ 13.5.6 磁通量子辐射的 Green 函数	525
1. Green 函数的定义	526
2. G 的表达式	527
3. 更有用的 G_c 形式	530
§ 13.5.7 磁通量子辐射	539
1. 求磁通量子的非辐射运动	539
2. 有效源点的计算	540
3. 一级校正计算	541
4. 确定辐射功率	543
5. 确定输出功率和效率	544
6. 简要注释	544
参考文献	546

第一章 Green 函数理论纲要

§ 1.1 引言

Green 函数在应用数学、理论物理、特别在量子理论、散射、统计物理学、固态、以及更新的量子化学的领域中,已经成为不可缺少的理论工具。近 30 多年来,Green 函数理论和方法取得了巨大的发展,已广泛地用于单体和多体量子体系的量子性质的研究。例如综合理论被用来研究量子核子,量子固体、量子原子和分子的运动性质和规律。在各个领域中相继提出了近似精确的 Green 函数方法,用以讨论各体系特殊相互作用的特征,诸如固体中的长程相互作用,原子核中的短程相互作用,推演出许多有用的近似,其中典型示例包括由特种 Feynman 图形的部分求和导出的近似,无规周相近似(RPA),阶梯图形等。由第二、第三阶梯图形可以得到所有级数的阶梯图形,代数图形构造(ADC)不仅适用于原子,而且特别适用于分子研究。可以列举诸多的近似 Green 函数。本书系统地介绍了 Green 函数理论在量子物质中的特殊作用及其应用的主要成效。为此目的特辟本章。

本章主要介绍一般 Green 函数理论纲要,基本原理及特性。