

К 100-летию академика Л.Д. Ландау

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
И НАУКИ УКРАИНЫ**

**ХАРЬКОВСКИЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени В.Н. Каразина**

А.М. ЕРМОЛАЕВ, Г.И. РАШБА

**Л Е К Ц И И
ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ
И КИНЕТИКЕ**

5. Функции Грина в квантовой статистике

Учебно-методическое пособие

Харьков 2009

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73
Е74

*Рекомендовано кафедрой теоретической физики
имени академика И.М. Лифшица (протокол № 18 от 14 ноября 2008 г.)*

*Утверждено Ученым советом физического факультета
Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина
(протокол № 10 от 19 декабря 2008 г.)*

Рецензенты:

А.С. Ковалев, доктор физ.-мат. наук, вед. научн. сотр. ФТИНТ НАН
Украины, профессор;
В.В. Ульянов, доктор физ.-мат. наук, профессор (ХНУ).

Ермолаев А.М., Рашба Г.И.

Лекции по квантовой статистике и кинетике.

5. Функции Грина в квантовой статистике:

Учебно-методическое пособие для студентов физических специальностей
университетов. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2009. – 144 с.

В учебно-методическом пособии изложен формализм современной квантовой статистики и кинетики, основанный на методах квантовой теории поля. Основное внимание уделено применению метода квантовых функций Грина и функциональных методов в теории конденсированного состояния вещества.

В пятой главе изложены формализм квантовых функций Грина и функциональные методы в квантовой статистике. Общая теория используется для расчета термодинамических величин электронной жидкости в проводниках.

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73

© ХНУ имени В.Н. Каразина, 2009

© А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, 2009

Содержание

5. Функции Грина в квантовой статистике.....	4
5.1. Нормальное и хронологическое произведение операторов. Свертка.....	4
5.2. Функции Грина при нулевой температуре.....	8
5.3. Временная, запаздывающая и опережающая функции Грина при конечных температурах.....	12
5.4. Температурные функции Грина.....	13
5.5. Температурные функции Грина и континуальные интегралы.....	20
5.6. Спектральные представления функций Грина.....	22
5.7. Соотношения между функциями Грина.....	29
5.8. Функции Грина свободных частиц.....	31
5.9. Связь термодинамического потенциала с функцией Грина.....	40
5.10. Температурный оператор рассеяния.....	42
5.11. Функции Грина в представлении взаимодействия.....	47
5.12. Диаграммы Фейнмана.....	49
5.13. Собственно-энергетическая функция.....	59
5.14. Приближение Хартри-Фока.....	63
5.15. Эффективное взаимодействие. Поляризационный оператор.....	69
5.16. Приближение хаотических фаз.....	74
5.17. Плазмоны.....	76
5.18. Экранирование в вырожденном электронном газе.....	82
5.19. Уравнения для функций Грина. Двухчастичная функция Грина.....	84
5.20. Вершинная функция.....	88
5.21. Каналы частица-дырка и частица-частица.....	93
5.22. Производящий функционал для функций Грина.....	99
5.23. Теория возмущений и функциональные методы.....	106
5.24. Электрон-электронное взаимодействие и континуальные интегралы.....	112
Приложение 1.....	120
Приложение 2.....	129
Задачи.....	134

5. Функции Грина в квантовой статистике

5.1. Нормальное и хронологическое произведение операторов. Свертка

Наряду с обычным произведением операторов часто используется нормальное произведение. С ним мы уже встречались в рр. 3.1, 3.3, 3.6. Напомним, что для перехода от обычного произведения полевых операторов к нормальному необходимо представить каждый из сомножителей в виде суммы рождающей и уничтожающей части и после перемножения переставить эти части так, чтобы все операторы рождения стояли слева от операторов уничтожения. При этом каждая перестановка стоящих рядом фермиевских операторов сопровождается изменением знака. В случае бозевских операторов знак не меняется. Нормальное произведение обозначается символом $::$ или N . Приведем простые примеры нормальных произведений фермиевских полевых операторов.

В р. 2.10 полевые операторы уничтожения ψ и рождения ψ^+ электронов были представлены в виде сумм операторов уничтожения и рождения частиц и дырок:

$$\psi(q) = \psi(q)^{(+)} + \psi(q)^{(-)}, \quad \psi^+(q) = \psi^+(q)^{(+)} + \psi^+(q)^{(-)},$$

где индексами \pm в скобках отмечены рождающая и уничтожающая части операторов ψ и ψ^+ . Используя эти обозначения, находим

$$N(1) = 1, N \left(\begin{matrix} + \\ \psi^{(-)} \psi^{(-)} \end{matrix} \right) = \psi^{(-)} \psi^{(-)},$$

$$N(\psi) = \psi, N \left(\begin{matrix} + \\ \psi^{(+)} \psi^{(+)} \end{matrix} \right) = \psi^{(+)} \psi^{(+)},$$

$$N(\psi^+) = \psi^+, N \left(\begin{matrix} + \\ \psi^{(-)} \psi^{(+)} \end{matrix} \right) = -\psi^{(+)} \psi^{(-)},$$

$$N \left[\psi^+(q) \psi(q') \right] = \psi^+(q)^{(+)} \psi(q')^{(+)} + \psi^+(q)^{(+)} \psi(q')^{(-)} + \\ + \psi^+(q)^{(-)} \psi(q')^{(-)} - \psi(q')^{(+)} \psi^+(q)^{(-)}.$$

Отметим два свойства нормального произведения операторов (N -произведения). Под знаком N -произведения можно совершать любую перестановку операторов, меняя знак при каждой перестановке фермиевских операторов. Другими словами, в случае фермионов операторы под знаком N -произведения ведут себя как переменные Грассмана, а в случае бозонов – как комплексные числа. Другое свойство N -произведения (кроме $N(1) = 1$) состоит в том, что его вакуумное среднее равно нулю:

$$\langle 0 | N(\dots) | 0 \rangle = 0. \quad (5.1)$$

Это равенство вытекает из формул (2.158).

В дальнейшем мы будем иметь дело с операторами вторичного квантования и с полевыми операторами, зависящими от времени. В частности, операторы в представлении Гейзенберга удовлетворяют уравнениям движения (1.55) и зависят от времени по закону (1.54), если только гамильтониан H системы не зависит от времени. Для операторов в представлении Дирака соответствующие формулы равны (1.75) и (1.76). Для зависящих от времени

операторов $a(t), a^+(t), \psi(t), \psi^+(t)$ введем понятие хронологического произведения (T -произведения). В случае фермионов оно лишь знаком отличается от T -произведения, введенного в р. 1.4. Чтобы получить T -произведение из обычного произведения фермиевских операторов, необходимо переставить последние таким образом, чтобы их временные аргументы возрастали справа налево:

$$T[F_1(t_1)F_2(t_2)\dots F_n(t_n)] = (-1)^p F_{i_1}(t_{i_1})F_{i_2}(t_{i_2})\dots F_{i_n}(t_{i_n}), \quad (5.2)$$

где $t_{i_1} > t_{i_2} > \dots > t_{i_n}$. Знак в (5.2) выбирается в зависимости от того, четную (p – четное число) или нечетную (p – нечетное число) перестановку фермиевских операторов приходится делать при переходе от исходного порядка сомножителей к хронологическому. В случае совпадающих времен у некоторых операторов в (5.2) условились располагать их в нормальном порядке. Например, для фермионов

$$T[\psi(t_1)\psi^+(t_2)] = \begin{cases} \psi(t_1)\psi^+(t_2), & t_1 > t_2, \\ -\psi^+(t_2)\psi(t_1), & t_1 \leq t_2. \end{cases} \quad (5.3)$$

В случае бозевских операторов знак при транспозиции операторов не меняется. Как и в случае N -произведения, фермиевские операторы под знаком T -произведения ведут себя как переменные Грассмана, а бозевские – как комплексные числа.

Хронологическое произведение имеет смысл в применении не только к операторам поля, но и к их комбинациям, содержащим произведения отнесенных к одному моменту времени полевых операторов. Именно такой случай рассмотрен в р. 1.4, где при перестановке гамильтонианов взаимодействия знак не меняется, потому что они содержат четное число фермиевских операторов.

Разность между хронологическим и нормальным произведением двух операторов в представлении взаимодействия называется сверткой этих операторов:

$$F_1^a(t_1)F_2^a(t_2) = T[F_1(t_1)F_2(t_2)] - N[F_1(t_1)F_2(t_2)]. \quad (5.4)$$

Операторы в свертке снабжаются одинаковым индексом (a в (5.4)). Часто свертка операторов обозначается символом

$$F_1(t_1)F_2(t_2).$$

Разбивая свободные фермиевские полевые операторы на суммы рождающих и уничтожающих частей, легко показать, что свертка операторов уничтожения или рождения равна нулю, а свертка оператора уничтожения с оператором рождения – c -число, равное

$$\begin{aligned} \psi_\alpha^a(\vec{r}, t)\psi_{\alpha'}^+(\vec{r}', t')|_{t>t'} &= \\ &= \frac{1}{V}\delta_{\alpha\alpha'}\sum_{k>k_F}\exp\left[i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t-t')\right], \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \psi_\alpha^a(\vec{r}, t)\psi_{\alpha'}^+(\vec{r}', t')|_{t<t'} &= \\ &= -\frac{1}{V}\delta_{\alpha\alpha'}\sum_{k<k_F}\exp\left[i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k(t-t')\right] \end{aligned}$$

(см. обозначения в гл. 2).

Операторы в свертке можно переставлять:

$$\psi^a(t_1)\psi^+(t_2) = \mp\psi^+(t_2)\psi^a(t_1), \quad (5.6)$$

где верхний знак относится к фермионам, а нижний – к бозонам.

Вакуумное среднее равенства (5.4) с учетом (5.1) равно

$$F_1^a(t_1)F_2^a(t_2) = \langle 0|T[F_1(t_1)F_2(t_2)]|0\rangle, \quad (5.7)$$

поскольку $\langle 0|0\rangle = 1$.

5.2. Функции Грина при нулевой температуре

В этом разделе мы ограничимся лишь определениями функций Грина системы при нулевой температуре и кратко перечислим их основные свойства. Методы вычислений гриновских функций и их связь с термодинамическими и кинетическими величинами будут рассмотрены ниже при конечных температурах.

Важную роль в теории систем многих частиц играют частичные функции Грина. Одночастичная функция Грина определяется формальным выражением

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(x_1, x_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_0 | T [\psi_{\alpha_1}(x_1) \psi_{\alpha_2}^+(x_2)] | \psi_0 \rangle, \quad (5.8)$$

где $|\psi_0\rangle$ – вектор основного состояния системы взаимодействующих частиц, $\psi_\alpha(x)$ и $\psi_\alpha^+(x)$ – гейзенберговские полевые операторы, $x = (\vec{r}, t)$, α – спиновая переменная. Определенная этим соотношением гриновская функция называется причинной.

Введем также запаздывающую G^+ и опережающую G^- функции Грина фермионов:

$$G_{\alpha_1\alpha_2}^\pm(x_1, x_2) = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm t_1 \mp t_2) \langle \psi_0 | \{\psi_{\alpha_1}(x_1), \psi_{\alpha_2}^+(x_2)\} | \psi_0 \rangle, \quad (5.9)$$

где $\{\psi_1, \psi_2^+\}$ – антикоммутатор операторов (1.20), а Θ – функция Хевисайда (1.200). В случае бозонов антикоммутатор необходимо заменить коммутатором.

Подставляя разложения (2.37) полевых операторов по произвольному базису $\{\varphi_k(q)\}$ в формулу (5.8), получаем

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2) = \sum_{k_1 k_2} \varphi_{k_1}(\vec{r}_1) \varphi_{k_2}^*(\vec{r}_2) G_{\alpha_1\alpha_2}(k_1, t_1; k_2, t_2), \quad (5.10)$$

где

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(k_1, t_1; k_2, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi_0 | T [a_{k_1\alpha_1}(t_1) a_{k_2\alpha_2}^+(t_2)] | \psi_0 \rangle, \quad (5.11)$$

функция Грина в (k, t) -представлении, k – орбитальные квантовые числа частицы.

Остановимся на физическом смысле функции (5.11) (см. Р. Маттук, Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел, 1969; Х. Хакен, Квантовополевая теория твердого тела, 1980). При $t_1 > t_2$ имеем

$$i\hbar G_{k_1k_2}(t_1 > t_2) = \langle \psi_0 | e^{\frac{i}{\hbar}Ht_1} a_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_2)} a_{k_2}^+ e^{-\frac{i}{\hbar}Ht_2} | \psi_0 \rangle$$

(индекс α включен в k). Здесь $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht_2} | \psi_0 \rangle$ – кет-вектор основного состояния системы фермионов в момент t_2 , а $a_{k_2}^+ e^{-\frac{i}{\hbar}Ht_2} | \psi_0 \rangle$ – вектор такого состояния, которое получено путем добавления к основному состоянию в момент t_2 одной пробной частицы с квантовыми числами k_2 . Следовательно,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_2)} a_{k_2}^+ e^{-\frac{i}{\hbar}Ht_2} | \psi_0 \rangle = | A \rangle$$

вектор состояния системы в момент t_1 при условии, что в момент $t_2 < t_1$ к ней была добавлена частица с квантовыми числами k_2 . Введем бра-вектор

$$\langle B | = \langle \psi_0 | e^{\frac{i}{\hbar}Ht_1} a_{k_1}.$$

Сопряженный ему вектор равен

$$| B \rangle = a_{k_1}^+ e^{-\frac{i}{\hbar}Ht_1} | \psi_0 \rangle$$

(см. (1.25)). Здесь $|B\rangle$ – кет-вектор состояния с одной частицей в состоянии k_1 , добавленной к основному состоянию в момент $t_1 > t_2$. Следовательно,

$$i\hbar G_{k_1 k_2}(t_1 > t_2) = \langle B|A\rangle$$

– амплитуда вероятности того, что если в момент t_2 к системе взаимодействующих частиц в основном состоянии добавляется частица с квантовыми числами k_2 , то в момент $t_1 > t_2$ система будет находиться в основном состоянии, а добавленная частица – в состоянии k_1 , т. е. $i\hbar G_{k_1 k_2}(t_1 > t_2)$ – амплитуда перехода частицы из состояния k_2 в состояние k_1 за время $t_1 - t_2$. Квадрат модуля этой величины дает вероятность перехода $k_2 \rightarrow k_1$. Если $t_1 < t_2$, то из (5.11) получаем

$$-i\hbar G_{k_1 k_2}(t_1 < t_2) = \langle \psi_0 | e^{\frac{i}{\hbar} H t_2} a_{k_2}^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)} a_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar} H t_1} | \psi_0 \rangle = \langle D|C\rangle,$$

где

$$|C\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)} a_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar} H t_1} | \psi_0 \rangle$$

– состояние системы в момент t_2 при условии, что в момент $t_1 < t_2$ удалена частица (рождена дырка) с квантовыми числами k_1 , а

$$|D\rangle = a_{k_2} e^{-\frac{i}{\hbar} H t_2} | \psi_0 \rangle$$

– кет-вектор состояния системы с пробной дыркой в состоянии k_2 , добавленной к основному состоянию в момент $t_2 > t_1$, т. е. $\langle D|C\rangle$ – амплитуда перехода $k_1 \rightarrow k_2$ дырки за время $t_2 - t_1$. Отметим, что пробные частицы нельзя отличить от таких же частиц, образующих основное состояние. Кроме того, в системе взаимодействующих фермионов нет четкой границы Ферми. Это означает, что добавленная к основному состоянию

частица может иметь как импульс $p < p_F$, так и импульс $p > p_F$. Аналогично находим, что $i\hbar G_{\alpha_1\alpha_2}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2)$ (5.8) – амплитуда перехода частицы из «точки» $(\vec{r}_2, \alpha_2, t_2)$ в «точку» $(\vec{r}_1, \alpha_1, t_1)$.

В этой главе мы ограничимся рассмотрением немагнитных пространственно-однородных равновесных систем. Функция (5.8) такой системы диагональна по спиновым индексам и зависит от разностей $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, $t = t_1 - t_2$:

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2) = \delta_{\alpha_1\alpha_2} G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, t_1 - t_2). \quad (5.12)$$

Совершим фурье-преобразование по этим разностям:

$$G(\vec{r}, t) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} G(\vec{p}, \varepsilon) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)\right], \quad (5.13)$$

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \int d\vec{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt G(\vec{r}, t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)\right].$$

Из формул (5.9) следует, что в фурье-амплитуде $G^+(\vec{p}, \varepsilon)$ интегрирование по t осуществляется от 0 до ∞ , а в $G^-(\vec{p}, \varepsilon)$ – от $-\infty$ до 0. В результате функция $G^+(\vec{p}, \varepsilon)$ регулярна в верхней полуплоскости комплексной энергии ε , а $G^-(\vec{p}, \varepsilon)$ – в нижней полуплоскости. Эти свойства функций $G^\pm(\varepsilon)$ будут использованы ниже.

Двухчастичная функция Грина K при нулевой температуре определяется соотношением

$$(i\hbar)^2 K(3, 4; 1, 2) = -\langle \psi_0 | T(\psi_3 \psi_4 \psi_1^+ \psi_2^+) | \psi_0 \rangle, \quad (5.14)$$

где $1 = (\vec{r}_1, \alpha_1, t_1)$, ... Она равна амплитуде перехода двух пробных частиц из точек 1 и 2 в точки 3 и 4. Позже мы введем

аналогичную функцию при конечной температуре и рассмотрим ее свойства.

5.3. Временная, запаздывающая и опережающая функции Грина при конечных температурах

Введенные в предыдущем разделе функции Грина описывают распространение одной, двух и большего числа частиц, добавленных к системе таких же частиц при нулевой температуре. Поэтому эти функции часто называются пропагаторами. Естественно предположить, что пропагаторы равновесной системы при конечной температуре изображаются теми же формулами (5.8), (5.9), (5.11), (5.14), в которых необходимо заменить среднее по основному состоянию системы $\langle \psi_0 | \dots | \psi_0 \rangle$ средним по каноническому

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Spe}^{-\beta H} \dots}{\text{Spe}^{-\beta H}}$$

или большому каноническому

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Spe}^{-\beta H'} \dots}{\text{Spe}^{-\beta H'}}$$

ансамблю Гиббса. Здесь $\beta = 1/kT$ (T – температура, k – постоянная Больцмана), $H' = H - \mu N$, где H – гамильтониан системы, μ – ее химический потенциал, N – оператор числа частиц. Следовательно, временная, запаздывающая и опережающая функции Грина фермионов при конечной температуре определяются соотношениями

$$G_{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \left\langle T_t \left[\psi_{\alpha_1}(\vec{r}_1, t_1) \psi_{\alpha_2}^+(\vec{r}_2, t_2) \right] \right\rangle, \quad (5.15)$$

$$G_{\alpha_1 \alpha_2}^{\pm}(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2) = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm t_1 \mp t_2) \left\langle \left\{ \psi_{\alpha_1}(\vec{r}_1, t_1), \psi_{\alpha_2}^+(\vec{r}_2, t_2) \right\} \right\rangle, \quad (5.16)$$

где оператор хронологического упорядочения обозначен символом T_t , чтобы отличить его от температуры. Полевые операторы по-прежнему записаны в представлении Гейзенберга.

Функции Грина (5.15) и (5.16) немагнитной пространственно-однородной равновесной системы диагональны по спиновым индексам и зависят от разностей $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, $t = t_1 - t_2$. Они могут быть представлены в виде интегралов фурье (5.13) по переменным \vec{r} и t . Амплитуды Фурье $G^+(\varepsilon)$ и $G^-(\varepsilon)$ регулярны в верхней и нижней ε -полуплоскостях соответственно.

5.4. Температурные функции Грина

Термодинамические функции идеальных ферми- и бозе-газов хорошо известны из курса статистической физики. Гамильтониан этих систем в представлении вторичного квантования имеет вид

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k, \quad (5.17)$$

где ε_k – энергия частицы в состоянии k , a_k и a_k^+ – операторы уничтожения и рождения частиц в этом состоянии. Гамильтониан межчастичного взаимодействия (2.127) при изучении идеальных систем не учитывается. Между тем взаимодействие частиц друг с другом существенно влияет на свойства системы. Оно не только обуславливает поправки к термодинамическим величинам идеальных систем, но может изменить структуру основного состояния и характер спектра элементарных возбуждений системы. Учет эффектов межчастичного взаимодействия – одна из основных задач статистической физики. В этой главе мы покажем, как эта задача может быть решена методом температурных функций

Грина, разработанным Г. Мацубарой, А.А. Абрикосовым, Л.П. Горьковым и И.Е. Дзялошинским в 1955 году.

Из квантовой механики известно, что частицы следует рассматривать как кванты некоторого поля. Например, частицы и дырки, рассмотренные в р. 2.10, появляются в результате квантования электронного поля $\psi_\alpha(\vec{r}, t)$. Операторы уничтожения и рождения электронов в точке \vec{r} в момент времени t с проекцией спина α будем по-прежнему обозначать $\psi_\alpha(\vec{r}, t)$, $\psi_\alpha^+(\vec{r}, t)$ соответственно. В фиксированный момент t они подчиняются перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} \{\psi_\alpha(\vec{r}), \psi_{\alpha'}(\vec{r}')\} &= 0, \quad \{\psi_\alpha^+(\vec{r}), \psi_{\alpha'}^+(\vec{r}')\} = 0, \\ \{\psi_\alpha(\vec{r}), \psi_{\alpha'}^+(\vec{r}')\} &= \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \end{aligned} \quad (5.18)$$

где $\{a, b\} = ab + ba$ – антикоммутатор операторов a и b . В случае бозонов антикоммутаторы в (5.18) необходимо заменить коммутаторами.

Пусть H – гамильтониан взаимодействующих друг с другом частиц. Он имеет вид

$$H = H_0 + V, \quad (5.19)$$

где H_0 – гамильтониан свободных частиц (5.17), а V – гамильтониан межчастичного взаимодействия. По аналогии с (1.54) введем мацубаровские полевые операторы:

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\vec{r}, \tau) &= e^{\tau H'} \psi_\alpha(\vec{r}) e^{-\tau H'}, \\ \bar{\psi}_\alpha(\vec{r}, \tau) &= e^{\tau H'} \psi_\alpha^+(\vec{r}) e^{-\tau H'}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Здесь τ – вспомогательная вещественная переменная, заключенная в промежутке

$$0 \leq \tau \leq \beta \quad (5.21)$$

(β – обратная температура);

$$H' = H - \mu N = H'_0 + V, \quad H'_0 = H_0 - \mu N, \quad (5.22)$$

N – оператор числа частиц в системе, μ – ее химический потенциал; $\psi_\alpha(\vec{r})$ и $\psi_\alpha^+(\vec{r})$ – полевые операторы в представлении Шредингера. Гамильтониан H' через эти операторы выражается так:

$$H' = \sum_\alpha \int d^3r \psi_\alpha^+(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \mu \right] \psi_\alpha(\vec{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'} \int d^3r \int d^3r' \psi_\alpha^+(\vec{r}) \psi_{\alpha'}^+(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \psi_{\alpha'}(\vec{r}') \psi_\alpha(\vec{r}), \quad (5.23)$$

где m – масса частицы, v – энергия взаимодействия двух частиц, Δ – лапласиан, $\int d^3r$ – интегрирование по объему системы.

Используя операторы (5.20), определим одночастичную температурную функцию Грина формальным соотношением:

$$G_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \tau, \vec{r}', \tau') = -\langle T_\tau [\psi_\alpha(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_{\alpha'}(\vec{r}', \tau')] \rangle, \quad (5.24)$$

где угловыми скобками обозначено среднее по большому каноническому ансамблю Гиббса. Символ T_τ означает, что операторы в квадратных скобках должны быть расставлены в хронологическом порядке. Это такой порядок, при котором аргумент τ операторных сомножителей растет справа налево. В случае ферми-частиц результат необходимо умножить на $(-1)^p$, где p – число перестановок фермиевских операторов при переходе от исходного порядка под знаком T_τ к хронологическому порядку. Например,

$$T_\tau [\psi(\tau)\bar{\psi}(\tau')] = \begin{cases} \psi(\tau)\bar{\psi}(\tau'), & \tau > \tau', \\ -\bar{\psi}(\tau')\psi(\tau), & \tau \leq \tau'. \end{cases} \quad (5.25)$$

Неравенства (5.21) обеспечивают сходимость следа операторов в формуле (5.24). Ниже мы рассмотрим связь функции Грина (5.24) с термодинамическими величинами системы и методы ее вычисления. Здесь же ограничимся изучением ее общих свойств.

Температурная (мацубаровская) функция Грина (5.24) связана с временной функцией Грина. Используя большой канонический ансамбль, определим последнюю соотношением

$$G_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -\frac{i}{\hbar} \left\langle T_t [\psi_\alpha(\vec{r}, t) \psi_{\alpha'}^+(\vec{r}', t')] \right\rangle, \quad (5.26)$$

где t и t' – временные аргументы,

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\vec{r}, t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} H' t\right) \psi_\alpha(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H' t\right), \\ \psi_\alpha^+(\vec{r}, t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} H' t\right) \psi_\alpha^+(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H' t\right) \end{aligned} \quad (5.27)$$

– полевые операторы в представлении Гейзенберга, T_t – символ хронологического упорядочения по переменной t . Переход от представления Гейзенберга (5.27) к (5.20) осуществляется заменой $it/\hbar \rightarrow \tau$, причем временные аргументы считаются чисто мнимыми, принадлежащими промежутку $[0, -i\hbar\beta]$. Функция (5.26) описывает распространение возмущения, при котором одна частица добавляется к равновесной системе или удаляется из нее. Когда $t > t'$, оператор рождения, действуя первым, вызывает возмущение путем добавления к системе частицы в «точке» (\vec{r}', α', t') . Это возмущение распространяется до момента t , когда частица удаляется из системы в «точке» (\vec{r}, α, t) . В

момент t возмущение снимается, система возвращается в равновесное состояние. Если же $t < t'$, первым действует оператор уничтожения. Возмущение распространяется теперь до момента t' . В этот момент частица добавляется в «точку» (\vec{r}', α', t') , а система возвращается в равновесное состояние.

Одночастичная равновесная матрица плотности (4.164) связана с функцией Грина (5.24) соотношением

$$\rho_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{N} G_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \tau; \vec{r}', \tau + 0).$$

Она не зависит от τ .

Подставляя операторы (5.20) в формулу (5.24), учитывая выражение для гиббсовского статоператора и используя циклическую инвариантность следа, легко убедиться в том, что функция Грина (5.24) зависит от разности $\tau = \tau_1 - \tau_2$. Эта разность заключена в промежутке

$$-\beta \leq \tau \leq \beta. \quad (5.28)$$

В пространственно-однородной системе функция Грина (5.24) зависит от $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$.

Убедимся в том, что фермиевская функция Грина $G(\tau)$, заданная в промежутке (5.28), удовлетворяет условию

$$G(\tau < 0) = -G(\tau + \beta > 0). \quad (5.29)$$

Из определения (5.24) следует, что

$$G(\tau + \beta > 0) = -\text{Sp} \left\{ e^{\beta(\Omega - H')} e^{(\tau + \beta)H'} \psi e^{-(\tau + \beta)H'} \bar{\psi} \right\},$$

где Ω – большой потенциал системы. Циклически переставляя операторы под знаком следа, перепишем это выражение в виде

$$G(\tau + \beta > 0) = -\text{Sp} \left\{ e^{\beta(\Omega - H')} \bar{\psi} e^{\tau H'} \psi e^{-\tau H'} \right\} = -G(\tau < 0).$$

Это равенство совпадает с (5.29). В случае бозонов

$$G(\tau < 0) = G(\tau + \beta). \quad (5.30)$$

Соотношения (5.29), (5.30) называются условиями Кубо-Мартина-Швингера.

По переменным \vec{r} , τ можно совершить фурье-преобразование функции Грина (5.24). Преобразование Фурье по переменной \vec{r} запишем в виде (1.194), (5.13). Что касается переменной τ , то функция $G(\tau)$, заданная в промежутке (5.28), может быть представлена в виде ряда Фурье:

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{+\infty} G(\zeta_s) e^{-i\zeta_s \tau},$$

$$G(\zeta_s) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G(\tau) e^{i\zeta_s \tau},$$

(5.31)

где $\zeta_s = \frac{\pi s}{\beta}$, s – номер «временной» компоненты Фурье. Выясним, как условие (5.29) влияет на компоненту Фурье $G(\zeta_s)$. Для этого интеграл, входящий в (5.31), представим в виде

$$\int_{-\beta}^{\beta} d\tau = \int_{-\beta}^0 d\tau + \int_0^{\beta} d\tau.$$

В первом слагаемом учтем условие (5.29) и перейдем к интегрированию по переменной $\tau' = \tau + \beta$. Тогда

$$G(\zeta_s) = \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau G(\tau) e^{i\zeta_s \tau} (1 - e^{-i\zeta_s \beta}).$$

Если

$$\zeta_s = \frac{\pi}{\beta} (2s + 1), \quad (5.32)$$

где $s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, то выражение в скобках под знаком интеграла равняется двойке. В противном случае оно равно нулю. Следовательно, для фермионов

$$G(\zeta_s) = \int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{i\zeta_s \tau}, \quad (5.33)$$

где ζ_s равно (5.32). В случае бозонов компонента Фурье по-прежнему равна (5.33), однако

$$\zeta_s = \frac{2\pi s}{\beta}. \quad (5.34)$$

Выражения (5.32) и (5.34) называются нечетными и четными мацубаровскими «частотами». Таким образом, функция (5.24) может быть представлена в виде

$$G(\vec{r}, \tau) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G(\vec{p}, \zeta_s) e^{i\left(\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - \zeta_s \tau\right)}, \quad (5.35)$$

где вектор \vec{p} и ζ_s (5.32) или (5.34) нумеруют компоненты Фурье. Обратное преобразование имеет вид

$$G(\vec{p}, \zeta_s) = \int d^3 r \int_0^\beta d\tau G(\vec{r}, \tau) e^{-i\left(\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - \zeta_s \tau\right)}. \quad (5.36)$$

Отсюда видно, что для вычисления $G(\zeta_s)$ необходимо знать $G(\tau)$ лишь при $\tau \geq 0$.

В дальнейшем мы увидим, что для вычисления одночастичной функции Грина системы взаимодействующих частиц необходимо знать двухчастичную функцию Грина K . Она определяется соотношением

$$K(34, 12) = -\langle T_\tau (\psi_3 \psi_4 \bar{\psi}_1 \bar{\psi}_2) \rangle, \quad (5.37)$$

где $1 = (\alpha_1, \vec{r}_1, \tau_1)$, ... Эта функция описывает возмущения, вызываемые добавлением к системе двух частиц или удалением двух частиц из системы. Например, если τ_2 и τ_3 превышают τ_1 и τ_4 , то функция K описывает возмущение при

добавлении к системе одной частицы и удалении из нее одной частицы и последующее возвращение системы к равновесию в результате удаления одной частицы и добавления одной частицы.

5.5. Температурные функции Грина и континуальные интегралы

Представим функции Грина (5.24), (5.37) и n -частичную функцию Грина в (k, τ) -представлении

$$\begin{aligned}
 & G^{(n)}(k_1\tau_1, \dots, k_n\tau_n; k_{2n}\tau_{2n}, \dots, k_{n+1}\tau_{n+1}) = \\
 & = \frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H'} T_\tau \left[a_{k_1}^M(\tau_1) \dots a_{k_n}^M(\tau_n) \bar{a}_{k_{n+1}}^M(\tau_{n+1}) \dots \bar{a}_{k_{2n}}^M(\tau_{2n}) \right] \right\} \\
 & (5.38)
 \end{aligned}$$

в виде континуальных интегралов. Здесь индексом M отмечены операторы в представлении Мацубары (5.20), а

$$\Xi = \text{Sp} \exp(-\beta H')$$

– статсумма для большого канонического ансамбля Гиббса.

Пусть $\tau_1 > \tau_2$. Тогда одночастичная функция Грина в (k, τ) -представлении равна

$$\begin{aligned}
G(k_1, k_2, \tau_1 > \tau_2) &= \\
&= -\frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left(e^{-\beta H'} e^{\tau_1 H'} a_{k_1} e^{-\tau_1 H'} e^{\tau_2 H'} a_{k_2}^+ e^{-\tau_2 H'} \right) = \quad (5.39) \\
&= -\frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left(e^{\int_{\tau_1}^{\beta} d\tau H'} a_{k_1} e^{\int_{\tau_2}^{\tau_1} d\tau H'} a_{k_2}^+ e^{\int_0^{\tau_2} d\tau H'} \right).
\end{aligned}$$

Входящим сюда операторам вторичного квантования $a_{k_1}, a_{k_2}^+$ в представлении Шредингера удобно приписать индексы τ_1, τ_2 , чтобы указать их место в хронологическом произведении. Видно, что операторы в (5.39) расположены в хронологическом порядке. (В таком же порядке сомножители расположены и в континуальном интеграле, см. pp. 1.5, 3.7.) Следовательно, выражение (5.39) может быть представлено в виде

$$G(k_1 \tau_1, k_2 \tau_2) = -\frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left\{ T_{\tau} \left[e^{\int_0^{\beta} d\tau H'} a_{k_1}(\tau_1) a_{k_2}^+(\tau_2) \right] \right\}, \quad (5.40)$$

где шредингеровские операторы a, a^+ снабжены индексами τ_1, τ_2 . Формула (5.40) справедлива и при $\tau_1 < \tau_2$. Аналогично функция (5.38) равна

$$\begin{aligned}
G^{(n)}(k_1 \tau_1, \dots, k_n \tau_n; k_{2n} \tau_{2n}, \dots, k_{n+1} \tau_{n+1}) &= \\
&= \frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left\{ T_{\tau} \left[e^{-\int_0^{\beta} d\tau H'} a_{k_1}(\tau_1) \dots a_{k_n}(\tau_n) a_{k_{n+1}}^+(\tau_{n+1}) \dots a_{k_{2n}}^+(\tau_{2n}) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

В частности, двухчастичная функция Грина (5.37) имеет вид

$$\begin{aligned}
& K(k_1\tau_1, k_2\tau_2; k_4\tau_4, k_3\tau_3) = \\
& = \frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left\{ T_\tau \left[e^{-\int_0^\beta d\tau H'} a_{k_1}(\tau_1) a_{k_2}(\tau_2) a_{k_3}^+(\tau_3) a_{k_4}^+(\tau_4) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Учитывая хронологическое расположение операторов под знаком континуального интеграла, а также формулы (3.156), (3.157), получаем представление функций Грина в виде континуальных интегралов:

$$\begin{aligned}
G(k_1\tau_1, k_2\tau_2) = & -\frac{1}{\Xi} \int D(z^*, z) \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left[\sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \times \right. \right. \\
& \left. \left. \times z_k(\tau) + H(z^*(\tau), z(\tau)) \right] \right\} z_{k_1}(\tau_1) z_{k_2}^*(\tau_2),
\end{aligned} \tag{5.41}$$

$$\begin{aligned}
G^{(n)}(k_1\tau_1, \dots, k_n\tau_n; k_{2n}\tau_{2n}, \dots, k_{n+1}\tau_{n+1}) = \\
= \frac{1}{\Xi} \int D(z^*, z) \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left[\sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \times \right. \right. \\
\left. \left. \times z_k(\tau) + H(z^*(\tau), z(\tau)) \right] \right\} z_{k_1}(\tau_1) \dots z_{k_n}(\tau_n) \times \\
\times z_{k_{n+1}}^*(\tau_{n+1}) \dots z_{k_{2n}}^*(\tau_{2n}),
\end{aligned} \tag{5.42}$$

где Ξ дается формулой (3.156), в которой H необходимо заменить на H' . Формулы (5.41) и (5.42) относятся как к бозонам, так и к фермионам. В случае бозонов z и z^* – комплексные числа, а в случае фермионов – переменные Грассмана.

5.6. Спектральные представления функций Грина

В этом разделе мы приводим полезные для дальнейшего интегральные представления фурье-компонент функций Грина (5.15), (5.16) и (5.24), полученные Л.Д. Ландау в 1958 году.

Функции Грина содержат гейзенберговские и мацубаровские полевые операторы (5.20), (5.27). Нам потребуются матричные элементы этих операторов, собранные на стационарных состояниях системы $\{|n\rangle\}$, где

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad (5.43)$$

E_n – энергия системы в состоянии n . Из (5.20), (5.27) и (5.43) следует

$$\begin{aligned} \langle n|\psi(\vec{r}, t)|m\rangle &= \langle n|\psi(\vec{r})|m\rangle e^{i\omega_{nm}t}, \\ \langle n|\psi(\vec{r}, \tau)|m\rangle &= \langle n|\psi(\vec{r})|m\rangle e^{i\omega_{nm}\tau}, \end{aligned} \quad (5.44)$$

где

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar}(E'_n - E'_m)$$

– частоты переходов между состояниями m и n , $E'_n = E_n - \mu N_n$, N_n – число частиц в состоянии n . Чтобы получить зависимость матричного элемента $\langle n|\psi(\vec{r})|m\rangle$ от \vec{r} , достаточно вспомнить аналогию между оператором трансляции вдоль временной оси и в пространстве. Трансляция вдоль временной оси характеризуется оператором эволюции (1.38), а трансляция в пространстве – оператором

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{P}\vec{r}\right),$$

где \vec{P} – оператор импульса системы. Это означает, что

$$\langle n|\psi(\vec{r})|m\rangle = \psi_{nm} e^{-i\vec{k}_{nm}\vec{r}},$$

где $\hbar\vec{k}_{nm} = \vec{P}_n - \vec{P}_m$ – изменение импульса системы при переходе $m \rightarrow n$. В результате

$$\begin{aligned}\langle n|\psi(\vec{r}, t)|m\rangle &= \psi_{nm} e^{i(\omega_{nm}t - \vec{k}_{nm}\vec{r})}, \\ \langle n|\psi(\vec{r}, \tau)|m\rangle &= \psi_{nm} e^{(i\hbar\omega_{nm}\tau - i\vec{k}_{nm}\vec{r})}.\end{aligned}$$

(5.45)

Матрица ψ_{nm} не зависит от \vec{r} и t .

Если учесть (5.45), то след произведения операторов, входящих в функцию Грина $G^+(\vec{r}, t)$ (5.16), будет равен

$$G^+(\vec{r}, t > 0) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{mn} |\psi_{nm}|^2 \exp\left[i(\omega_{nm}t - \vec{k}_{nm}\vec{r})\right] (\rho_n + \rho_m), \quad (5.46)$$

где

$$\rho_n = \frac{e^{-\beta E'_n}}{\sum_n e^{-\beta E'_n}}$$

– равновесная функция распределения для большого канонического ансамбля Гиббса. Переобозначая индексы суммирования $n \leftrightarrow m$ во втором слагаемом (5.46), получаем

$$\begin{aligned}G^+(\vec{r}, t > 0) &= \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{mn} \rho_n |\psi_{nm}|^2 \exp\left[i(\omega_{nm}t - \vec{k}_{nm}\vec{r})\right] (1 + e^{\beta\hbar\omega_{nm}}).\end{aligned} \quad (5.47)$$

Пространственная компонента фурье этой функции может быть найдена при помощи фурье-представления δ -функции

$$\int d^3r e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}), \quad (5.48)$$

а временная компонента Фурье содержит интеграл

$$\int_0^\infty dt e^{i\omega t}, \quad (5.49)$$

который нуждается в доопределении (см. цитированную книгу Д.А. Киржница). Можно воспользоваться тем фактом, что фурье-компонента $G^+(\varepsilon)$ регулярна в верхней ε -

полуплоскости. Это свойство будет учтено, если мы определим интеграл (5.49) соотношением

$$\int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} = \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} = \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{i}{\omega + i\eta} = \frac{i}{\omega + i0}. \quad (5.50)$$

Тогда фурье-компонента запаздывающей функции Грина (5.47) становится равной

$$G^+(\vec{p}, \varepsilon) = (2\pi\hbar)^3 \sum_{mn} \rho_n |\psi_{nm}|^2 \left(1 + e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}\right) \frac{\delta(\vec{p} - \hbar\vec{k}_{mn})}{\varepsilon - \hbar\omega_{mn} + i0}. \quad (5.51)$$

Особенности этой функции переменной ε лежат в нижней ε -полуплоскости.

Функция (5.51) имеет вещественную и мнимую части. Они разделяются при помощи известного из теории функций комплексного переменного тождества Сохоцкого-Племеля¹⁾:

$$\frac{1}{x \pm i0} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)^1, \quad (5.52)$$

которое имеет смысл под знаком интеграла (P – символ главного значения интеграла). Тождество (5.52) дает

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G^+(\vec{p}, \varepsilon) &= (2\pi\hbar)^3 \sum_{mn} \rho_n |\psi_{nm}|^2 \left(1 + e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}\right) \times \\ &\quad \times \delta(\vec{p} - \hbar\vec{k}_{mn}) P \frac{1}{\varepsilon - \hbar\omega_{mn}}, \\ \operatorname{Im} G^+(\vec{p}, \varepsilon) &= -\pi (2\pi\hbar)^3 \sum_{mn} \rho_n |\psi_{nm}|^2 \left(1 + e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}\right) \times \\ &\quad \times \delta(\vec{p} - \hbar\vec{k}_{mn}) \delta(\varepsilon - \hbar\omega_{mn}). \end{aligned} \quad (5.53)$$

¹⁾ Его часто называют тождеством Дирака.

Легко проверить, что вещественная и мнимая части (5.53) связаны дисперсионным соотношением

$$\operatorname{Re} G^+(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\operatorname{Im} G^+(\vec{p}, \varepsilon')}{\varepsilon' - \varepsilon}. \quad (5.54)$$

Кроме того, функция (5.51) может быть представлена в виде

$$G^+(\vec{p}, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\rho(\vec{p}, \varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' + i0}, \quad (5.55)$$

где

$$\begin{aligned} \rho(\vec{p}, \varepsilon) = & (2\pi\hbar)^3 \sum_{mn} \rho_n |\psi_{nm}|^2 \left(1 + e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}\right) \times \\ & \times \delta(\vec{p} - \hbar\vec{k}_{mn}) \delta(\varepsilon - \hbar\omega_{mn}). \end{aligned} \quad (5.56)$$

Интегральное представление (5.55) называется спектральным представлением запаздывающей функции Грина, а множитель $\rho(\vec{p}, \varepsilon)$ под интегралом называется спектральной плотностью функции Грина (5.55). Снова используя тождество (5.52), из (5.55) получаем

$$\rho(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G^+(\vec{p}, \varepsilon). \quad (5.57)$$

дальше мы увидим, что спектральное разложение (5.55) представляет собой суперпозицию функций Грина свободных частиц, различающихся переменной ε' , а спектральная плотность (5.56) – весовой множитель в этой суперпозиции.

Те же рассуждения позволяют получить спектральное представление опережающей функции Грина (5.16):

$$G^-(\vec{p}, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\rho(\vec{p}, \varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' - i0}. \quad (5.58)$$

Отметим, что формулы (5.55) и (5.58) представляют функции $G^+(\varepsilon)$ и $G^-(\varepsilon)$, регулярные в верхней и нижней ε -полуплоскостях соответственно. Для получения $G^+(\varepsilon)$ в нижней и $G^-(\varepsilon)$ в верхней полуплоскостях необходимо совершить процедуру аналитического продолжения на эти полуплоскости (см. Ю.В. Сидоров, М.В. Федорюк, М.И. Шабунин, Лекции по теории функций комплексного переменного, 1982).

Компонента Фурье временной функции Грина фермионов (5.15) может быть представлена в виде

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = (2\pi\hbar)^3 \sum_{mn} \rho_n |\psi_{nm}|^2 \left[P \frac{1}{\varepsilon - \hbar\omega_{mn}} (1 + e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}) - i\pi\delta(\varepsilon - \hbar\omega_{mn})(1 - e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}) \right] \delta(\vec{p} - \hbar\vec{k}_{mn}). \quad (5.59)$$

Вещественная и мнимая части этой функции связаны интегральным соотношением

$$\operatorname{Re} G(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \operatorname{cth} \frac{\beta\varepsilon'}{2} \frac{\operatorname{Im} G(\vec{p}, \varepsilon')}{\varepsilon' - \varepsilon}. \quad (5.60)$$

Из формул (5.55) и (5.58) видно, что на вещественной оси ε запаздывающая и опережающая функции Грина связаны соотношением

$$G^-(\varepsilon) = [G^+(\varepsilon)]^*, \quad (5.61)$$

а на всей ε -плоскости

$$G^-(\varepsilon^*) = [G^+(\varepsilon)]^*.$$

Убедимся в том, что при $\varepsilon \rightarrow \infty$ функции Грина $G^\pm(\vec{p}, \varepsilon)$ убывают по закону

$$G^{\pm}(\vec{p}, \varepsilon) \rightarrow \frac{1}{\varepsilon}. \quad (5.62)$$

Для этого достаточно доказать, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho(\vec{p}, \varepsilon) = 1. \quad (5.63)$$

Для доказательства этого равенства учтем

$$G^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1 = t_2 + 0) = -\frac{i}{\hbar} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

где использованы перестановочные соотношения (5.18) для фермиевских операторов. Пространственная компонента Фурье этой функции равна

$$G^+(\vec{p}, t_1 = t_2 + 0) = -\frac{i}{\hbar} = \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \eta\right) G^+(\vec{p}, \varepsilon).$$

Подставим сюда спектральное разложение (5.55). Тогда

$$-\frac{i}{\hbar} = \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \rho(\vec{p}, \varepsilon') \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon - \varepsilon' + i\eta} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \eta\right).$$

Для вычисления интеграла $\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon$ дополним контур

интегрирования полуокружностью в нижней ε -полуплоскости и воспользуемся теорией вычетов. Получим

$$-\frac{i}{\hbar} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \rho(\vec{p}, \varepsilon'),$$

откуда следует равенство (5.63).

Для получения спектрального представления температурной функции Грина фермионов (5.24) вычислим входящий в нее след в том же базисе стационарных состояний $\{|n\rangle\}$ и воспользуемся матричным элементом мацубаровского

полевого оператора (5.45). Тогда под знаком суммы \sum_{mn} в фурье-компоненте фигурирует интеграл

$$\int_0^{\beta} d\tau e^{(i\zeta_s - \hbar\omega_{mn})\tau} = -\frac{1 + e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}}{i\zeta_s - \hbar\omega_{mn}},$$

поскольку $\exp(i\zeta_s\beta) = -1$. Компонента Фурье температурной функции Грина имеет вид

$$G(\vec{p}, \zeta_s) = (2\pi\hbar)^3 \sum_{mn} \rho_n |\psi_{nm}|^2 \frac{1 + e^{-\beta\hbar\omega_{mn}}}{i\zeta_s - \hbar\omega_{mn}} \delta(\vec{p} - \hbar\vec{k}_{mn}). \quad (5.64)$$

Легко проверить, что эта функция может быть записана в виде

$$G(\vec{p}, \zeta_s) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\rho(\vec{p}, \varepsilon')}{i\zeta_s - \varepsilon'}, \quad (5.65)$$

где множитель $\rho(\vec{p}, \varepsilon)$ равен (5.56). Мы получили спектральное представление температурной функции Грина фермионов, определенной в дискретных точках $i\zeta_s$ комплексной плоскости энергии, расположенных на мнимой оси. Формула (5.65) справедлива и для бозонов. Только теперь она дает значения функции $G(\hbar\omega_n)$ в дискретных точках $i\hbar\omega_n$ на мнимой оси, где ω_n – четные мацубаровские частоты.

Из формулы (5.65) видно, что

$$G(\vec{p}, -\zeta_s) = G^*(\vec{p}, \zeta_s). \quad (5.66)$$

Это означает, что для вычисления $G(\vec{p}, \zeta_s)$ достаточно знать эту функцию лишь при $\zeta_s > 0$.

5.7. Соотношения между функциями Грина

Здесь мы докажем, что для вычисления четырех функций Грина (5.15), (5.16) и (5.24) достаточно знать лишь

последнюю. Функции (5.15) и (5.16) могут быть получены из соотношений, связывающих их с (5.24). Связь G^+ с G^- уже была найдена раньше (см. (5.61)). Выясним, как связаны функции (5.15) и G^+ .

Сравнивая формулы (5.53) и (5.59), получаем в случае фермионов

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G(\bar{p}, \varepsilon) &= \operatorname{Re} G^+(\bar{p}, \varepsilon) = \operatorname{Re} G^-(\bar{p}, \varepsilon), \\ \operatorname{Im} G(\bar{p}, \varepsilon) &= \operatorname{th} \frac{\beta \varepsilon}{2} \operatorname{Im} G^+(\bar{p}, \varepsilon) = -\operatorname{th} \frac{\beta \varepsilon}{2} \operatorname{Im} G^-(\bar{p}, \varepsilon). \end{aligned} \quad (5.67)$$

Эти соотношения позволяют найти $G(\bar{p}, \varepsilon)$, если известны функции $G^\pm(\bar{p}, \varepsilon)$.

Свяжем теперь функцию $G^+(\bar{p}, \varepsilon)$ с $G(\bar{p}, \zeta_s)$. Из спектральных представлений (5.55) и (5.65) видно, что $G^+(i\zeta_s) = G(\zeta_s)$ при $\zeta_s > 0$. Чтобы расширить область определения функции в правой части этого равенства, обратимся к теореме единственности аналитического продолжения.

Пусть $f_1(z)$ и $f_2(z)$ – две функции, регулярные в области D комплексной плоскости. Допустим, что они совпадают на некоторой последовательности точек $\{z_n\}$ в области D , имеющей предельную точку $z_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} z_n$ в этой области. Тогда функции $f_1(z)$ и $f_2(z)$ совпадают во всей области D .

Из этой теоремы следует, что если бы удалось осуществить аналитическое продолжение функции $G(\zeta_s)$ с дискретных точек $i\zeta_s$ на верхнюю ε -полуплоскость, то аналитическое продолжение совпало бы с $G^+(\varepsilon)$.

Действительно, $G^+(\varepsilon)$ регулярна в верхней ε -полуплоскости. Она совпадает с $G(\zeta_s)$ на последовательности точек $\{i\zeta_s\}$, имеющей предельной бесконечно удаленную точку. Следовательно, зная $G(\zeta_s)$ в точках $i\zeta_s$ ($\zeta_s > 0$) и аналитически продолжая ее на всю верхнюю ε -полуплоскость, получаем функцию $G^+(\varepsilon)$. Продолжение на нижнюю полуплоскость дает другую функцию – опережающую функцию Грина $G^-(\varepsilon)$. В дальнейшем мы проиллюстрируем это утверждение на примере. С учетом требования (5.62) процедура аналитического продолжения однозначна.

Выражения (5.55), (5.58), (5.65), а также аналитическое продолжение температурной функции Грина на комплексную z -плоскость

$$G(\bar{p}, z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\rho(\bar{p}, \varepsilon')}{z - \varepsilon'} \quad (5.68)$$

представляют собой известные из теории функций интеграла типа Коши (см. Ф.Д. Гахов, Краевые задачи, 1963). Интеграл (5.68) можно рассматривать как единую аналитическую функцию в комплексной z -плоскости с разрезом вдоль вещественной оси. Она состоит из двух различных ветвей:

$$G(\bar{p}, z) = \begin{cases} G^+(z), & \text{Im } z > 0, \\ G^-(z), & \text{Im } z < 0, \end{cases} \quad (5.69)$$

где $G^+(z)$ регулярна в верхней, а $G^-(z)$ – в нижней полуплоскости энергетической переменной.

5.8. Функции Грина свободных частиц

Функция Грина (5.24) свободных электронов при $\tau > 0$ равна

$$G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(\vec{r}, \tau > 0) = -\langle \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_{\alpha'} \rangle_0, \quad (5.70)$$

где $\langle \dots \rangle_0$ – усреднение по большому каноническому ансамблю с гамильтонианом (5.17). Выбирая $k = (\vec{p}, \alpha)$, запишем этот гамильтониан в виде

$$H'_0 = \sum_{\vec{p}\alpha} \xi_{\vec{p}} a_{\vec{p}\alpha}^+ a_{\vec{p}\alpha}, \quad (5.71)$$

где $\xi_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}} - \mu$ – энергия электрона, отсчитанная от химпотенциала, $a_{\vec{p}\alpha}$ и $a_{\vec{p}\alpha}^+$ – операторы уничтожения и рождения электронов в состоянии с импульсом \vec{p} и проекцией спина α . Полевые операторы, входящие в (5.70), выражаются через эти операторы соотношениями

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}\alpha}(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}\right), \\ \bar{\psi}_{\alpha}(\vec{r}, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} \bar{a}_{\vec{p}\alpha}(\tau) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}\right), \end{aligned}$$

(5.72)

где V – объем системы. Подставляя выражения (5.72) в формулу (5.70), получаем

$$G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(\vec{r}, \tau > 0) = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\vec{p}'} \langle a_{\vec{p}\alpha}(\tau) a_{\vec{p}'\alpha'}^+ \rangle_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}\right). \quad (5.73)$$

Выясним, как входящий сюда оператор уничтожения электронов зависит от τ .

Произвольный оператор F в представлении Мацубары имеет вид (5.20)

$$F(\tau) = e^{\tau H'} F e^{-\tau H'}.$$

(5.74)

Он удовлетворяет уравнению движения

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} F(\tau) = [F(\tau), H']$$

(5.75)

с начальным условием

$$F(0) = F.$$

Здесь $[a, b] = ab - ba$ – коммутатор операторов a и b . Следовательно,

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} a_{\bar{p}\alpha}(\tau) = [a_{\bar{p}\alpha}(\tau), H'_0]. \quad (5.76)$$

Коммутатор в правой части этого уравнения легко вычисляется при помощи перестановочных соотношений (2.107)

$$\{a_1, a_{1'}\} = 0, \quad \{a_1^+, a_{1'}^+\} = 0, \quad \{a_1, a_{1'}^+\} = \delta_{11'} \quad (5.77)$$

где $1 = (\bar{p}, \alpha)$, $1' = (\bar{p}', \alpha')$. В результате уравнение (5.76) принимает вид

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} a_{\bar{p}\alpha}(\tau) = \xi_{\bar{p}} a_{\bar{p}\alpha}(\tau).$$

Его решением является функция

$$a_{\bar{p}\alpha}(\tau) = a_{\bar{p}\alpha} e^{-\xi_{\bar{p}} \tau}. \quad (5.78)$$

Аналогично можно показать, что

$$\bar{a}_{\bar{p}\alpha}(\tau) = a_{\bar{p}\alpha}^+ e^{\xi_{\bar{p}} \tau}. \quad (5.79)$$

Подставляя решение (5.78) в (5.73), находим

$$G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(\vec{r}, \tau > 0) = -\frac{1}{V} \sum_{\bar{p}\bar{p}'} \langle a_{\bar{p}\alpha} a_{\bar{p}'\alpha'}^+ \rangle_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r} - \xi_{\bar{p}} \tau\right). \quad (5.80)$$

Для вычисления среднего $\langle a_1 a_{1'}^+ \rangle_0$, входящего в (5.80), снова воспользуемся перестановочными соотношениями (5.77)

$$\langle a_1 a_{1'}^+ \rangle_0 = \delta_{11'} - \langle a_{1'}^+ a_1 \rangle_0 \quad (5.81)$$

и циклической инвариантностью следа

$$\langle a_1 a_1^+ \rangle_0 = \frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H'_0} a_1 a_1^+ \right\} = \frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left\{ a_1^+ e^{-\beta H'_0} a_1 \right\}, \quad (5.82)$$

где Ξ – большая статистическая сумма (4.93) идеального электронного газа. Входящее сюда произведение

$$a_1^+ e^{-\beta H'_0}$$

может быть преобразовано при помощи формулы (см. (5.74) и (5.79))

$$a_1^+ e^{\xi_{1'} \tau} = e^{\tau H'_0} a_1^+ e^{-\tau H'_0}.$$

При $\tau = \beta$ из этой формулы следует

$$a_1^+ e^{-\beta H'_0} = e^{\beta \xi_{1'}} e^{-\beta H'_0} a_1^+. \quad (5.83)$$

Подставляя это выражение в (5.82), получаем

$$\langle a_1 a_1^\dagger \rangle_0 = e^{\beta \xi_1'} \langle a_1^\dagger a_1 \rangle_0.$$

В результате соотношение (5.81) принимает вид

$$\langle a_1^\dagger a_1 \rangle_0 = \delta_{1'1} \bar{n}_1, \quad (5.84)$$

где

$$\bar{n}_1 = \left(e^{\beta \xi_1} + 1 \right)^{-1} \quad (5.85)$$

– фермиевская функция распределения. Подстановка (5.81) и (5.84) в (5.80) дает

$$G_{\alpha\alpha'}^{(0)} = G_0 \delta_{\alpha\alpha'},$$

где

$$G_0(\vec{r}, \tau > 0) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} (\bar{n}_{\vec{p}} - 1) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r} - \xi_{\vec{p}} \tau\right). \quad (5.86)$$

Сравнивая это выражение с формулой (5.35), получаем пространственную компоненту Фурье функции Грина (5.86):

$$G_0(\vec{p}, \tau > 0) = (\bar{n}_{\vec{p}} - 1) e^{-\xi_{\vec{p}} \tau}. \quad (5.87)$$

Если $\tau < 0$, находим

$$G_0(\vec{p}, \tau \leq 0) = \bar{n}_{\vec{p}} e^{-\xi_{\vec{p}} \tau}. \quad (5.88)$$

Временная компонента Фурье функции Грина равна

$$G_0(\vec{p}, \zeta_s) = \int_0^{\beta} d\tau G_0(\vec{p}, \tau) e^{i\zeta_s \tau} = \frac{1}{i\zeta_s - \xi_{\vec{p}}}. \quad (5.89)$$

Как и точная функция (5.36), она определена в точках

$$z_s = i\zeta_s = i\frac{\pi}{\beta}(2s+1), \quad (5.90)$$

расположенных на мнимой оси комплексной плоскости энергии.

Полезно использовать выражение (5.89) для получения формул (5.87) и (5.88). Для этого подставим (5.89) в сумму (5.31):

$$G_0(\bar{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_s \frac{e^{-i\zeta_s \tau}}{i\zeta_s - \xi_{\bar{p}}}$$

Чтобы вычислить входящую сюда сумму по нечетным мацубаровским частотам, рассмотрим контурный интеграл

$$J = \oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{-z\tau}}{(e^{-\beta z} + 1)(z - \xi_{\bar{p}})},$$

где контур C состоит из двух вертикальных прямых на рис. 5.1,

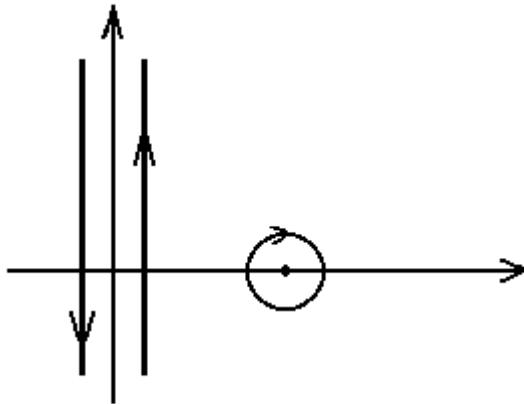


Рис. 5.1. Контур в интеграле J

охватывающих полюсы функции $(e^{-\beta z} + 1)^{-1}$ в точках $z_s = i\zeta_s$, а $\tau > 0$. Поскольку внутри контура C содержатся лишь

полюсы z_s , а вычет функции $(e^{-\beta z} + 1)^{-1}$ в полюсе равен β^{-1} , по теореме Коши интеграл J совпадает с G_0 . С другой стороны, подынтегральная функция при $\tau > 0$ позволяет деформировать контур C , превратив его в окружность вокруг полюса $\xi_{\vec{p}}$ (рис. 5.1). Вычисляя вычет в этом полюсе, получаем формулу (5.87). Если $\tau \leq 0$, необходимо рассмотреть интеграл

$$-\oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{-z\tau}}{(e^{\beta z} + 1)(z - \xi_{\vec{p}})}, \quad (5.91)$$

совпадающий с G_0 . Снова деформируя контур, как показано на рис. 5.1, получаем (5.88).

Двухчастичная функция Грина свободных электронов, собранная на операторах вторичного квантования, определяется выражением

$$K_0(34, 12) = -\langle T_\tau (a_3 a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2) \rangle_0, \quad (5.92)$$

где $1 = (\alpha_1, \vec{p}_1, \tau_1), \dots$. Если $\tau_3 > \tau_4 > \tau_1 > \tau_2$, с учетом (5.79) и (5.80) получаем

$$K_0(34, 12) = -e^{-(\xi_3 \tau_3 + \xi_4 \tau_4 - \xi_1 \tau_1 - \xi_2 \tau_2)} \langle a_3 a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2 \rangle_0, \quad (5.93)$$

где теперь индексы у операторов равны $1 = (\alpha_1, \vec{p}_1), \dots$. Используя перестановочные соотношения (5.77), переместим оператор a_3 в среднем направо:

$$\langle a_3 a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2 \rangle_0 = -\delta_{13} \langle a_4 \bar{a}_2 \rangle_0 + \delta_{23} \langle a_4 \bar{a}_1 \rangle_0 - \langle a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2 a_3 \rangle_0.$$

В выражении для среднего

$$\langle a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2 a_3 \rangle_0 = \frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left(e^{-\beta H'_0} a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2 a_3 \right)$$

переставим оператор a_3 налево и воспользуемся формулой

$$a_3 e^{-\beta H'_0} = e^{-\beta \xi_3} e^{-\beta H'_0} a_3,$$

аналогичной (5.83). Тогда среднее значение произведения четырех операторов будет равно

$$\begin{aligned} \langle a_3 a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2 \rangle_0 &= -\delta_{13} \left(1 + e^{-\beta \xi_3} \right)^{-1} \langle a_4 \bar{a}_2 \rangle_0 + \\ &+ \delta_{23} \left(1 + e^{-\beta \xi_3} \right)^{-1} \langle a_4 \bar{a}_1 \rangle_0. \end{aligned}$$

Поскольку

$$\left(1 + e^{-\beta \xi_3} \right)^{-1} = 1 - \bar{n}_3,$$

это среднее можно переписать в виде

$$\langle a_3 a_4 \bar{a}_1 \bar{a}_2 \rangle_0 = -\delta_{13} (1 - \bar{n}_3) \langle a_4 \bar{a}_2 \rangle_0 + \delta_{23} (1 - \bar{n}_3) \langle a_4 \bar{a}_1 \rangle_0. \quad (5.94)$$

Подставляя (5.94) в (5.93), получаем для двухчастичной функции Грина (5.92) при $\tau_3 > \tau_4 > \tau_1 > \tau_2$ выражение

$$\begin{aligned} K_0(34,12) &= e^{-(\xi_3 \tau_3 + \xi_4 \tau_4 - \xi_1 \tau_1 - \xi_2 \tau_2)} \times \\ &\times \left[\delta_{13} (1 - \bar{n}_3) \langle a_4 \bar{a}_2 \rangle_0 - \delta_{23} (1 - \bar{n}_3) \langle a_4 \bar{a}_1 \rangle_0 \right]. \end{aligned}$$

Если учесть (5.87) и (5.88), этой формуле можно придать вид

$$K_0(34,12) = G_0(3,1)G_0(4,2) - G_0(3,2)G_0(4,1), \quad (5.95)$$

где

$$G_0(1,2) = -\langle T_\tau(a_1 \bar{a}_2) \rangle_0 \quad (5.96)$$

– одночастичная функция Грина свободных электронов, собранная на операторах вторичного квантования. Формула (5.95) справедлива при любом соотношении времен τ .

Равенство (5.95) непосредственно обобщается на случай среднего значения любого числа операторов под знаком хронологического произведения. Из (5.95) видна процедура вычисления таких средних. Необходимо всеми возможными способами объединять (спаривать) операторы уничтожения с операторами рождения. Спариваются все операторы, а способы спаривания суммируются. Спаренные операторы необходимо поставить рядом и вынести за знак среднего (такая операция называется «выпутыванием»). При этом следует следить за числом перестановок фермиевских операторов, необходимых для этого. При нечетном числе перестановок слагаемое умножается на -1 . Если число перестановок четное, знак слагаемого остается прежним. Затем два спаренных оператора $a_i, \bar{a}_{i'}$ необходимо заменить множителем

$$\langle T_\tau(a_i \bar{a}_{i'}) \rangle_0 = -\langle T_\tau(\bar{a}_{i'} a_i) \rangle_0 = -G_0(i, i'). \quad (5.97)$$

В результате среднее значение хронологического произведения любого числа операторов (число операторов рождения должно равняться числу операторов уничтожения) равно сумме произведений попарных средних. Это утверждение называется теоремой Вика. Она справедлива и для среднего $\langle \dots \rangle_0$ от хронологического произведения полевых операторов. Мы доказали эту теорему на примере четырех операторов. Доказательство теоремы Вика при любом числе операторов содержится в Приложении 1.

Используя полученные в р. 5.7 связи функций Грина, получим запаздывающую, опережающую и временную

функции Грина свободных частиц. Аналитическое продолжение температурной функции Грина (5.89) на комплексную плоскость энергии имеет вид

$$G_0(\vec{p}, z) = \frac{1}{z - \xi_{\vec{p}}}. \quad (5.98)$$

Эта функция имеет простой полюс в точке $\xi_{\vec{p}}$ на вещественной оси, совпадающий со спектром свободной частицы. Из формулы (5.98) получаем

$$G_0^\pm(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\vec{p}} \pm i0}. \quad (5.99)$$

Следовательно, спектральная плотность гриновских функций свободных частиц (5.57) равна

$$\rho_0(\vec{p}, \varepsilon) = \delta(\varepsilon - \xi_{\vec{p}}).$$

Временную функцию Грина получаем из соотношений (5.67):

$$G_0(\vec{p}, \varepsilon) = P \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\vec{p}}} - i\pi \operatorname{th} \frac{\beta\varepsilon}{2} \delta(\varepsilon - \xi_{\vec{p}}). \quad (5.100)$$

Если температура стремится к нулю, эта функция переходит в

$$\lim_{T \rightarrow 0} G_0(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\vec{p}} + i0 \operatorname{sign} \varepsilon}, \quad (5.101)$$

поскольку

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \operatorname{th} \frac{\beta\varepsilon}{2} = \operatorname{sign} \varepsilon.$$

Функция (5.101) равна фурье-компоненте причинной функции Грина (5.8) свободных фермионов.

5.9. Связь термодинамического потенциала с функцией Грина

Вернемся к системе взаимодействующих электронов. Оператор плотности электронов в точке \vec{r} равен

$$n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}).$$

Его среднее по большому каноническому ансамблю Гиббса дает наблюдаемую плотность электронов:

$$n = \sum_{\alpha} \langle \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}) \rangle.$$

В однородной системе эта величина не зависит от \vec{r} . Следовательно, полное число частиц в объеме V системы равно

$$N = V \sum_{\alpha} \langle \psi_{\alpha}^{+} \psi_{\alpha} \rangle.$$

Это выражение можно записать в виде

$$N = V \sum_{\alpha} \text{Sp} \left\{ e^{\beta(\Omega - H')} \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}) e^{-\tau H'} e^{\tau H'} \psi_{\alpha}(\vec{r}) e^{-\tau H'} e^{\tau H'} \right\}.$$

Циклически переставляя операторы под знаком следа, получаем

$$N = V \sum_{\alpha} \langle \bar{\psi}_{\alpha}(\vec{r}, \tau) \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau) \rangle.$$

Как и следовало ожидать, плотность электронов в равновесной системе не зависит от времени. Входящее сюда среднее связано с функцией Грина (5.24) соотношением

$$\langle \bar{\psi}_{\alpha}(\vec{r}, \tau) \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau) \rangle = G_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \tau; \vec{r}, \tau + \delta) \Big|_{\delta \rightarrow 0^+},$$

где $\delta \rightarrow 0^+$ означает, что величина δ стремится к нулю со стороны положительных значений. В результате число электронов в системе связано с температурной функцией Грина соотношением

$$N = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} V \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \tau; \vec{r}, \tau + \delta).$$

Подставляя сюда фурье-разложение (5.35), находим

$$N = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} V \sum_{\alpha} \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G_{\alpha\alpha}(\vec{p}, \zeta_s) e^{i\zeta_s \delta}. \quad (5.102)$$

С другой стороны, плотность электронов может быть выражена через их функцию распределения $f(\vec{p})$ по импульсам:

$$\frac{N}{V} = 2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{p}). \quad (5.103)$$

Множитель $\sum_{\alpha} \delta_{\alpha\alpha} = 2$ перед интегралом учитывает две ориентации спина электрона. Сравнивая формулы (5.102) и (5.103), получаем связь функции распределения с гриновской функцией:

$$f(\vec{p}) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\beta} \sum_s G(\vec{p}, \zeta_s) e^{i\zeta_s \delta}. \quad (5.104)$$

Уравнение (5.102) дает число электронов в открытой системе, как функцию переменных V, T, μ , задающих ее макросостояние. Это число связано с производной от большого потенциала соотношением:

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{V, T}.$$

Интегрируя это соотношение по μ , получаем связь термодинамического потенциала Ω с температурной функцией Грина взаимодействующих электронов:

$$\Omega(V, T, \mu) = -2V \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_0^\mu d\mu \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_s G(\vec{p}, \zeta_s) e^{i\zeta_s \delta}. \quad (5.105)$$

Остальные термодинамические величины могут быть вычислены методами статистической физики и термодинамики.

В качестве примера использования формулы (5.104) рассмотрим идеальный электронный газ. Подставляя в (5.104) функцию Грина (5.89), получаем для функции распределения свободных электронов выражение

$$f_0(\vec{p}) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\zeta_s \delta}}{i\zeta_s - \xi_{\vec{p}}}, \quad (5.106)$$

где ζ_s – нечетные мацубаровские частоты (5.32). Эта сумма совпадает с интегралом (5.91) при $\tau \rightarrow 0^-$. Следовательно, функция распределения (5.106) может быть получена из (5.88) при $\tau = 0$. Как и следовало ожидать, она равна функции Ферми (5.85):

$$f_0(\vec{p}) = \bar{n}_{\vec{p}}. \quad (5.107)$$

Из формулы (5.105) видно, что для вычисления термодинамических величин системы взаимодействующих частиц необходимо знать одночастичную температурную функцию Грина (5.24). Ее вычисление – одна из актуальных задач статистической физики. Далее на примере нормальной электронной жидкости мы увидим, как решается эта задача.

5.10. Температурный оператор рассеяния

Операторы $\exp(\pm\tau H')$, входящие в формулы (5.20) и (5.24), нельзя представить в виде произведения операторов $\exp(\pm\tau H'_0)$ и $\exp(\pm\tau V)$, поскольку операторы H'_0 и V не

коммутируют. Поэтому введем новый оператор σ , определив его соотношением

$$e^{-(\tau-\tau_0)H'} = e^{-(\tau-\tau_0)H'_0} \sigma(\tau, \tau_0), \quad (5.108)$$

где τ и τ_0 принадлежат промежутку (5.21). В дальнейшем мы часто будем выбирать $\tau_0 = 0$ и обозначать $\sigma(\tau, 0) = \sigma(\tau)$. Из этой формулы видно, что

$$\sigma(\tau_0, \tau_0) = 1. \quad (5.109)$$

Получим дифференциальное уравнение для $\sigma(\tau)$. Для этого продифференцируем соотношение (5.108) по τ и учтем (5.22). В результате получим

$$-\frac{\partial \sigma(\tau)}{\partial \tau} = V_D(\tau) \sigma(\tau). \quad (5.110)$$

Здесь

$$V_D(\tau) = e^{\tau H'_0} V e^{-\tau H'_0} \quad (5.111)$$

— оператор межчастичного взаимодействия (см. последнее слагаемое в гамильтониане (5.23)) в представлении Дирака.

Уравнение (5.110) с начальным условием (5.109) эквивалентно интегральному уравнению

$$\sigma(\tau) = 1 - \int_0^{\tau} d\tau_1 V_D(\tau_1) \sigma(\tau_1). \quad (5.112)$$

Формальное решение этого уравнения представим в виде итерационного ряда по степеням V :

$$\sigma = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_n, \quad (5.113)$$

где $\sigma_0 = 1$,

$$\sigma_n(\tau) = (-1)^n \int_0^{\tau} d\tau_1 V_D(\tau_1) \int_0^{\tau_1} d\tau_2 V_D(\tau_2) \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n V_D(\tau_n).$$

В частности,

$$\sigma_2(\tau) = (-1)^2 \int_0^\tau d\tau_1 V_D(\tau_1) \int_0^{\tau_1} d\tau_2 V_D(\tau_2).$$

Здесь интегрирование выполняется по площади нижнего треугольника на рис. 5.2. Удобно перейти к интегрированию по квадрату со стороной τ .

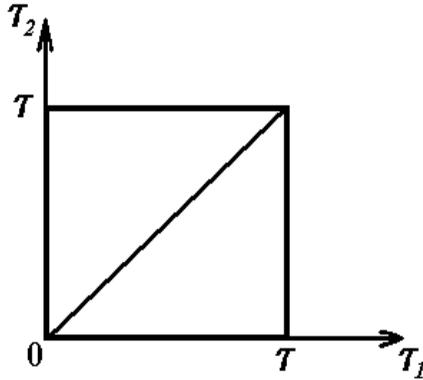


Рис. 5.2. Область интегрирования в $\sigma_2(\tau)$

Для этого запишем

$$\begin{aligned} \sigma_2 = & \frac{(-1)^2}{2} \int_0^\tau d\tau_1 V_D(\tau_1) \int_0^{\tau_1} d\tau_2 V_D(\tau_2) + \\ & + \frac{(-1)^2}{2} \int_0^\tau d\tau_2 V_D(\tau_2) \int_0^{\tau_2} d\tau_1 V_D(\tau_1). \end{aligned}$$

Второе слагаемое получено из первого заменой переменных интегрирования $\tau_1 \leftrightarrow \tau_2$. Во втором слагаемом интегрирование выполняется по верхнему треугольнику на рис. 5.2. Следовательно, σ_2 равно интегралу по квадрату

$$\sigma_2(\tau) = \frac{(-1)^2}{2} \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^\tau d\tau_2 T_\tau [V_D(\tau_1)V_D(\tau_2)],$$

где

$$T_\tau [V_D(\tau_1)V_D(\tau_2)] = \begin{cases} V_D(\tau_1)V_D(\tau_2), & \tau_1 > \tau_2, \\ V_D(\tau_2)V_D(\tau_1), & \tau_1 < \tau_2. \end{cases} \quad (5.114)$$

В отличие от определения (5.25) знаки в верхней и нижней строках (5.114) одинаковы, поскольку оператор V содержит четное число фермиевских операторов. Аналогично можно показать, что

$$\sigma_n(\tau) = \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\tau d\tau_1 \dots \int_0^\tau d\tau_n T_\tau [V_D(\tau_1) \dots V_D(\tau_n)].$$

Таким образом, оператор σ (5.113) представлен рядом

$$\sigma(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\tau d\tau_1 \dots \int_0^\tau d\tau_n T_\tau [V_D(\tau_1) \dots V_D(\tau_n)]. \quad (5.115)$$

Его записывают в виде

$$\sigma(\tau) = T_\tau \exp \left[- \int_0^\tau d\tau' V_D(\tau') \right]. \quad (5.116)$$

При $\tau_0 \neq 0$ это выражение принимает вид

$$\sigma(\tau, \tau_0) = T_\tau \exp \left[- \int_{\tau_0}^\tau d\tau' V_D(\tau') \right]. \quad (5.117)$$

Этот оператор обладает очевидным свойством

$$\sigma(\tau, \tau_1) \sigma(\tau_1, \tau_0) = \sigma(\tau, \tau_0), \quad (5.118)$$

где $\tau > \tau_1 > \tau_0$.

Если выбрать $\tau_0 = 0$, $\tau = \beta$, выражение (5.117) будет равно

$$\sigma(\beta) = T_\tau \exp \left[- \int_0^\beta d\tau V_D(\tau) \right]. \quad (5.119)$$

Этот оператор называется температурным оператором рассеяния. Представление этого оператора в виде итерационного ряда получается из (5.115) при $\tau = \beta$:

$$\sigma(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n T_\tau [V_D(\tau_1) \dots V_D(\tau_n)]. \quad (5.120)$$

Выразим большой потенциал системы электронов через температурный оператор рассеяния. Для этого оператор

$$e^{-\beta H'} = e^{-\beta H'_0} \sigma(\beta) \quad (5.121)$$

подставим в формулы (4.93), (4.94) и (4.96). Тогда

$$\rho = \frac{1}{\Xi} e^{-\beta H'_0} \sigma(\beta), \quad \Xi = \text{Sp} \left[e^{-\beta H'_0} \sigma(\beta) \right],$$

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Sp} e^{-\beta H'} = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Sp} \left[e^{-\beta H'_0} \sigma(\beta) \right].$$

Умножив и разделив аргумент логарифма на $e^{\beta \Omega_0}$, где Ω_0 – большой потенциал идеального электронного газа, получим

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta} \ln \langle \sigma(\beta) \rangle_0. \quad (5.122)$$

Здесь $\langle \dots \rangle_0$ – введенное ранее гиббсовское усреднение по состояниям системы невзаимодействующих электронов. Это соотношение может быть записано в эквивалентной форме

$$e^{\beta \Omega} = \frac{e^{\beta \Omega_0}}{\langle \sigma(\beta) \rangle_0}.$$

(5.123)

Оно позволяет представить большой потенциал в виде ряда теории возмущений по межчастичному взаимодействию.

5.11. Функции Грина в представлении взаимодействия

Соотношение (5.108) позволяет связать мацубаровские полевые операторы (5.20) с операторами в представлении Дирака. Последнее представление удобно в том случае, когда в гамильтониане системы (5.22) выделен гамильтониан взаимодействия. Поэтому это представление называют также представлением взаимодействия. Используя оператор (5.108)

$$e^{-\tau H'} = e^{-\tau H'_0} \sigma(\tau)$$

и ему обратный

$$e^{\tau H'} = \sigma^{-1}(\tau) e^{\tau H'_0},$$

запишем мацубаровские операторы (5.20) в виде

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\vec{r}, \tau) &= \sigma^{-1}(\tau) \psi_\alpha^D(\vec{r}, \tau) \sigma(\tau), \\ \bar{\psi}_\alpha(\vec{r}, \tau) &= \sigma^{-1}(\tau) \bar{\psi}_\alpha^D(\vec{r}, \tau) \sigma(\tau), \end{aligned} \quad (5.124)$$

где $\psi_\alpha^D(\vec{r}, \tau)$ и $\bar{\psi}_\alpha^D(\vec{r}, \tau)$ – полевые операторы в представлении Дирака. Любой оператор в этом представлении связан с оператором в представлении Шредингера соотношением

$$F_D(\tau) = e^{\tau H'_0} F e^{-\tau H'_0}. \quad (5.125)$$

В уравнение движения для этого оператора

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} F_D(\tau) = [F_D(\tau), H'_0] \quad (5.126)$$

гамильтониан взаимодействия V не входит.

Подставляя операторы (5.121) и (5.124) в функцию Грина (5.24), получаем при $\tau > \tau'$:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \vec{r}'; \tau - \tau' > 0) &= -e^{\beta \Omega} \text{Sp} [e^{-\beta H'_0} \sigma(\beta) \times \\ &\times \sigma^{-1}(\tau) \psi_\alpha^D(\vec{r}, \tau) \sigma(\tau) \sigma^{-1}(\tau') \bar{\psi}_{\alpha'}^D(\vec{r}', \tau') \sigma(\tau')]. \end{aligned} \quad (5.127)$$

Поскольку $\tau > \tau' > 0$, формула (5.118) имеет вид

$$\sigma(\tau, \tau')\sigma(\tau', 0) = \sigma(\tau, 0)$$

или

$$\sigma(\tau, \tau')\sigma(\tau') = \sigma(\tau).$$

Умножая это равенство справа на $\sigma^{-1}(\tau')$, находим

$$\sigma(\tau)\sigma^{-1}(\tau') = \sigma(\tau, \tau').$$

(5.128)

Аналогично получаем

$$\sigma(\beta)\sigma^{-1}(\tau) = \sigma(\beta, \tau), \quad (5.129)$$

поскольку $\beta > \tau > 0$. Формулы (5.128) и (5.129) позволяют переписать выражение (5.127) в виде

$$G_{\alpha\alpha'}(\bar{r}, \bar{r}'; \tau - \tau' > 0) = -e^{\beta H_0} \text{Sp} \left[e^{-\beta H_0} \sigma(\beta, \tau) \times \right. \\ \left. \times \psi_\alpha^D(\bar{r}, \tau) \sigma(\tau, \tau') \bar{\psi}_{\alpha'}^D(\bar{r}', \tau') \sigma(\tau', 0) \right].$$

Множители при $e^{-\beta H_0}$ под знаком следа расположены в хронологическом порядке, следовательно,

$$G_{\alpha\alpha'}(\bar{r}, \bar{r}'; \tau - \tau' > 0) = -e^{\beta H_0} \times \\ \times \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H_0} T_\tau \left[\psi_\alpha^D(\bar{r}, \tau) \bar{\psi}_{\alpha'}^D(\bar{r}', \tau') \sigma(\beta) \right] \right\}.$$

Это равенство справедливо и при $\tau < \tau'$. Если вместо $e^{\beta H_0}$ подставить сюда (5.123), получим

$$G_{\alpha\alpha'}(\bar{r}, \tau; \bar{r}', \tau') = - \frac{\left\langle T_\tau \left[\psi_\alpha^D(\bar{r}, \tau) \bar{\psi}_{\alpha'}^D(\bar{r}', \tau') \sigma(\beta) \right] \right\rangle_0}{\left\langle \sigma(\beta) \right\rangle_0}.$$

(5.130)

Одночастичная функция Грина записана в представлении взаимодействия. Полевые операторы, входящие в (5.130), подчиняются уравнениям движения (5.126) для свободных частиц. Гамильтониан межчастичного взаимодействия содержится только в температурном операторе рассеяния.

Выражение, аналогичное (5.130), можно получить и для двухчастичной функции Грина (5.37).

5.12. Диаграммы Фейнмана

Если подставить разложение (5.120) в формулу (5.130) и разделить ряд в числителе на ряд в знаменателе, мы получим представление функции Грина взаимодействующих электронов в виде ряда теории возмущений по степеням межчастичного взаимодействия:

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} G^{(n)}.$$

В нулевом приближении эта функция совпадает с функцией Грина (5.70) свободных частиц. Поправка первого порядка может быть получена из выражения

$$-\frac{\left\langle T_{\tau} \left\{ \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_{\alpha'}(\vec{r}', \tau') \left[1 - \int_0^{\beta} d\tau_1 V(\tau_1) \right] \right\} \right\rangle}{\left\langle 1 - \int_0^{\beta} d\tau_1 V(\tau_1) \right\rangle}, \quad (5.131)$$

если в разложении этой величины ограничиться линейными по V членами. Здесь и в дальнейшем мы опускаем индекс D у операторов и шляпки над ними, а также индекс 0 у символа среднего. Учитывая (5.23), поправку первого порядка к числителю в (5.131) запишем в виде

$$\tilde{G}_{00'}^{(1)} = \frac{1}{2} \int d1 \int d2 V_{12} \left\langle T_{\tau} (\psi_0 \bar{\psi}_{0'} \bar{\psi}_1 \bar{\psi}_2 \psi_2 \psi_1) \right\rangle, \quad (5.132)$$

где $0 = (\alpha, x)$, $0' = (\alpha', x')$, $x = (\vec{r}, \tau)$, $x' = (\vec{r}', \tau')$, $1 = (\alpha_1, x_1)$, ... ,

$$\int d1 = \sum_{\alpha_1} \int d^3 r_1 \int_0^{\beta} d\tau_1, \dots,$$

$$V_{12} = \nu (|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) \delta(\tau_1 - \tau_2) = V_{21}. \quad (5.133)$$

Среднее от хронологического произведения шести полевых операторов в (5.132) вычисляется при помощи теоремы Вика. Существует шесть способов спаривания трех операторов уничтожения с тремя операторами рождения:

$$\begin{aligned} \psi_0^a \bar{\psi}_0^a \bar{\psi}_1^b \bar{\psi}_2^c \psi_2^b \psi_1^c, & \quad \psi_0^a \bar{\psi}_0^a \bar{\psi}_1^b \bar{\psi}_2^c \psi_2^c \psi_1^b, \\ \psi_0^a \bar{\psi}_0^b \bar{\psi}_1^a \bar{\psi}_2^c \psi_2^b \psi_1^c, & \quad \psi_0^a \bar{\psi}_0^b \bar{\psi}_1^a \bar{\psi}_2^c \psi_2^c \psi_1^b, \\ \psi_0^a \bar{\psi}_0^b \bar{\psi}_1^c \bar{\psi}_2^a \psi_2^b \psi_1^c, & \quad \psi_0^a \bar{\psi}_0^b \bar{\psi}_1^c \bar{\psi}_2^a \psi_2^c \psi_1^b. \end{aligned} \quad (5.134)$$

Здесь спаренные операторы снабжены одинаковыми индексами a, b, c . Выражения (5.134) необходимо просуммировать. Затем спаренные операторы в каждом слагаемом необходимо поставить рядом, умножив слагаемое на $(-1)^P$, где P – число перестановок фермиевских операторов, которые необходимо при этом выполнить. Заменяя пару спаренных операторов функцией Грина свободных частиц (5.96) и учитывая выражение $n_1^0 = \langle \bar{\psi}_1 \psi_1 \rangle$ для плотности частиц в идеальном ферми-газе, получаем

$$\begin{aligned} \langle T_\tau (\psi_0 \bar{\psi}_0 \bar{\psi}_1 \bar{\psi}_2 \psi_2 \psi_1) \rangle &= G_{00}^0 G_{12}^0 G_{21}^0 - G_{00}^0 n_1^0 n_2^0 - \\ &- G_{01}^0 G_{20}^0 G_{12}^0 + G_{01}^0 G_{10}^0 n_2^0 + G_{02}^0 G_{20}^0 n_1^0 - G_{02}^0 G_{10}^0 G_{21}^0. \end{aligned}$$

В результате поправка (5.132) принимает вид

$$\begin{aligned}
-\tilde{G}_{00'}^{(1)} = & \frac{1}{2} \int d1 \int d2 (-V_{12}) \left[-(-G_{00'}^0)(-G_{12}^0)(-G_{21}^0) + \right. \\
& + (-G_{00'}^0)n_1^0 n_2^0 + (-G_{01}^0)(-G_{20'}^0)(-G_{12}^0) + \\
& + (-G_{01}^0)(-G_{10'}^0)n_2^0 + (-G_{02}^0)(-G_{20'}^0)n_1^0 + \\
& \left. + (-G_{02}^0)(-G_{10'}^0)(-G_{21}^0) \right].
\end{aligned} \tag{5.135}$$

Третье и шестое слагаемые в квадратных скобках (5.135) отличаются только переменными интегрирования. Поскольку $V_{12} = V_{21}$, их вклад в поправку (5.135) одинаков. Это относится также к четвертому и пятому слагаемым. В результате

$$\begin{aligned}
-\tilde{G}_{00'}^{(1)} = & \int d1 \int d2 (-V_{12}) \left[-\frac{1}{2}(-G_{00'}^0)(-G_{12}^0)(-G_{21}^0) + \right. \\
& + \frac{1}{2}(-G_{00'}^0)n_1^0 n_2^0 + (-G_{01}^0)(-G_{20'}^0)(-G_{12}^0) + \\
& \left. + (-G_{01}^0)(-G_{10'}^0)n_2^0 \right].
\end{aligned} \tag{5.136}$$

Каждому слагаемому в выражении (5.136) можно сопоставить диаграмму на плоскости. Диаграмма состоит из точек (узлов, вершин), сплошных и штриховых линий, петель. Эти элементы сопоставляются отдельным множителям в (5.136) по правилам, приведенным на рис. 5.3.

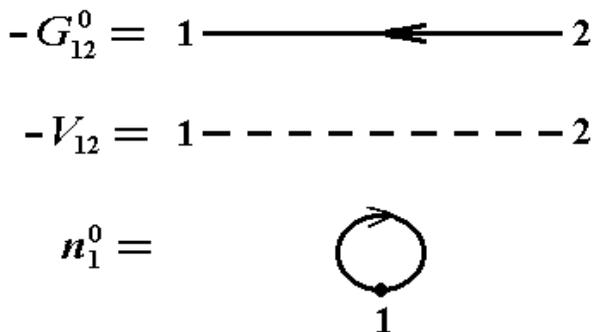


Рис. 5.3. Элементы диаграмм Фейнмана

Сплошная линия между точками 1 и 2 изображает распространение свободной частицы от точки 2 до точки 1, штриховая линия означает межчастичное взаимодействие.

Петле с одним узлом 1 сопоставляется плотность частиц n_1^0 . Используя эти правила, сопоставим поправке (5.136) четыре диаграммы на рис. 5.4. Такие диаграммы были введены

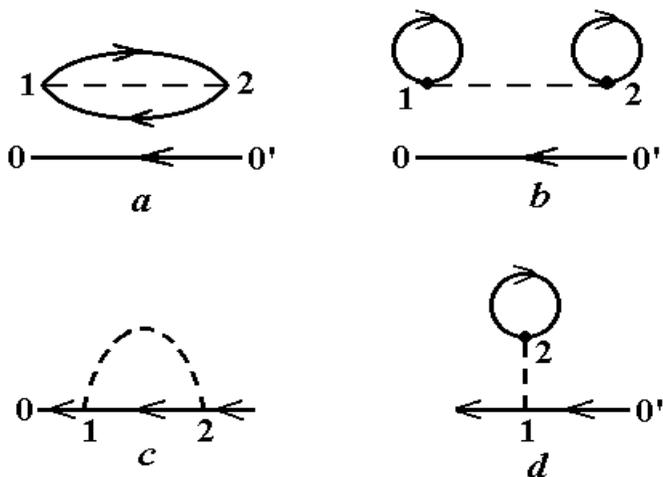


Рис. 5.4. Диаграммы первого порядка для поправки (5.136) к функции Грина

впервые в квантовой электродинамике Р. Фейнманом (1949). Поэтому они называются фейнмановскими диаграммами. Каждая диаграмма может быть наглядно истолкована как некоторый процесс распространения частицы в системе таких же частиц. Например, диаграмма на рис. 5.4 (с) изображает процесс распространения свободной частицы от точки $0'$ до точки 2. В точке 2 она испытывает акт взаимодействия и снова движется свободно до точки 1. Испытав повторно акт взаимодействия в точке 1, частица движется затем до точки 0.

Диаграммы a и b на рис. 5.4 соответствуют таким способам спаривания операторов (5.134), когда спариваются операторы уничтожения и рождения с «говорящими» индексами 0 и $0'$, а операторы, входящие в σ , спариваются между собой. Такие диаграммы называются «несвязными». Диаграммы c и d , напротив, «связные». Из формулы (5.131) следует, что вклад несвязных диаграмм в поправку $G^{(1)}$ компенсируется, если учесть разложение знаменателя

$$\left[1 - \int_0^\beta d\tau_1 V(\tau_1) \right]^{-1} \approx 1 + \int_0^\beta d\tau_1 V(\tau_1).$$

После разложения видно, что знаки перед интегралами $\int_0^\beta d\tau_1$ в числителе и знаменателе (5.131) противоположные. Компенсация несвязных диаграмм происходит во всех порядках теории возмущений. Следовательно, необходимо в разложении функции Грина учитывать только связные диаграммы и не обращать внимания на знаменатель в (5.130). Это означает, что поправка первого порядка к свободной функции Грина равна

$$\begin{aligned}
 -\tilde{G}_{00'}^{(1)} = \int d1 \int d2 (-V_{12}) & \left[(-G_{01}^0) (-G_{20'}^0) (-G_{12}^0) + \right. \\
 & \left. + (-G_{01}^0) (-G_{10'}^0) n_2^0 \right].
 \end{aligned}
 \tag{5.137}$$

Правила соответствия между аналитическими выражениями и диаграммами, приведенные на рис. 5.3, необходимо дополнить. А именно, в выражении для поправки к функции Грина необходимо выполнить интегрирование $\int d1, \dots$ по координатам внутренних вершин $1, 2, \dots$. Кроме того, существует дополнительное правило знаков, с которыми слагаемые входят в поправку (5.137). Из формулы (5.136) видно, что знак первого слагаемого в квадратных скобках противоположен знаку остальных слагаемых. Это связано с наличием замкнутой электронной петли с двумя вершинами 1 и 2 на рис. 5.4 (a). Можно показать, что вклад диаграммы любого порядка в $(-G)$ входит со знаком $(-1)^L$, где L – число замкнутых фермионных петель на диаграмме с более чем одной вершиной. Сформулированные здесь правила соответствия остаются справедливыми и в высших приближениях теории возмущений. Они позволяют написать аналитическое выражение для любой диаграммы Фейнмана. Следовательно, необходимо раньше изобразить все диаграммы n -го порядка, а затем сопоставить им аналитические выражения. При этом достаточно ограничиться только топологически неэквивалентными диаграммами, т. е. такими, которые нельзя получить друг из друга перестановкой операторов V . Примерами топологически эквивалентных диаграмм являются диаграммы, соответствующие третьему и шестому, а также четвертому и пятому слагаемым в формуле (5.135). Замена двух топологически эквивалентных диаграмм одной (см. рис. 5.4(c,d)) устраняет множитель $1/2$ в (5.135).

Связные топологически неэквивалентные диаграммы второго порядка изображены на рис. 5.5.

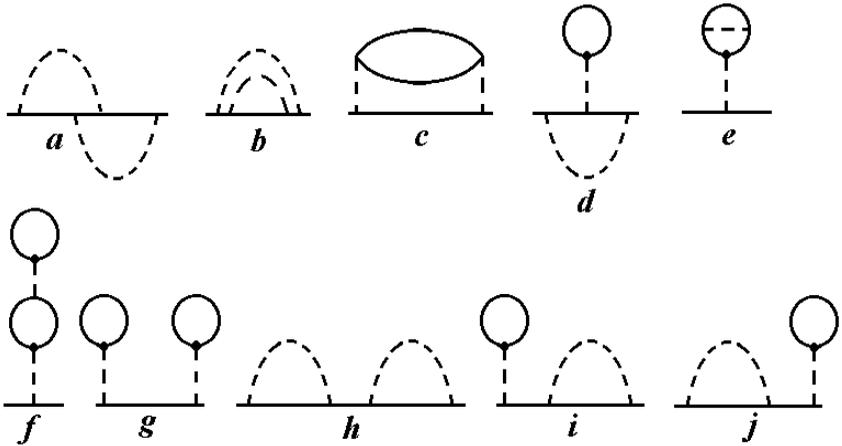


Рис. 5.5. Диаграммы второго порядка для функции Грина

До сих пор мы рассматривали правила соответствия между диаграммами и формулами в координатном представлении. Между тем, в однородных системах более удобным оказывается импульсное представление функции Грина. Рассмотрим переход к этому представлению на примере первого слагаемого в формуле (5.137). Входящие в эту формулу функции Грина свободных частиц зависят от разностей $x - x'$. По этим разностям выполним фурье-разложение (5.35). Разложение Фурье функции V_{12} (5.133) имеет обычный вид

$$V(x) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} V(\vec{q}, \omega_n) e^{iqx}, \quad (5.138)$$

где

$$qx = \vec{q}\vec{r} - \hbar\omega_n\tau,$$

ω_n – четные мацубаровские частоты (5.34). Компонента Фурье функции (5.138) равна

$$V(\vec{q}, \omega_n) = \nu(\vec{q}), \quad (5.139)$$

где $\nu(\vec{q})$ – пространственная фурье-компонента энергии взаимодействия двух частиц. Функция (5.139) не зависит от ω_n , так как запаздывание межчастичного взаимодействия не учитывается.

Подставляя разложения (5.35) и (5.138) в первое слагаемое (5.137), получаем

$$\begin{aligned} -G_{\alpha\alpha'}^{1c}(x, x') &= -\delta_{\alpha\alpha'} G_{1c}(x, x'), \\ -G_{1c}(x, x') &= \int dx_1 \int dx_2 \left[-\int \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s_1} G_0(\vec{p}_1, \zeta_{s_1}) \times \right. \\ &\times e^{\frac{i}{\hbar} p_1(x-x_1)} \left. \left[-\int \frac{d^3 p_2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s_2} G_0(\vec{p}_2, \zeta_{s_2}) e^{\frac{i}{\hbar} p_2(x_1-x_2)} \right] \times \right. \\ &\times \left[-\int \frac{d^3 p_3}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s_3} G_0(\vec{p}_3, \zeta_{s_3}) e^{\frac{i}{\hbar} p_3(x_2-x')} \right] \times \\ &\times \left. \left[-\int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta} \sum_n \nu(\vec{q}) e^{iq(x_1-x_2)} \right]. \right. \end{aligned} \quad (5.140)$$

Здесь $px = \vec{p}\vec{r} - \hbar\zeta_s\tau$, $\int dx = \int d^3r \int_0^\beta d\tau$. Входящие в (5.140) интегралы $\int dx_1 \int dx_2$ вычисляются по формуле

$$\int d^3r \int_0^\beta d\tau e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r} - i\zeta_s\tau} = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}) \beta \delta_{s_0}. \quad (5.141)$$

Эта формула позволяет переписать (5.140) в виде

$$\begin{aligned}
 -G_{1c}(x-x') = & \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s_1} \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s_2} \left[-G_0(\vec{p}_1, \zeta_{s_1}) \right]^2 \times \\
 & \times \left[-G_0(\vec{p}_2, \zeta_{s_2}) \right] \times \left[-\nu \left(\frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{\hbar} \right) \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} p_1 (x-x') \right].
 \end{aligned} \tag{5.142}$$

Как и следовало ожидать, поправка (5.142) в однородной равновесной системе зависит от разностей $\vec{r} - \vec{r}'$, $\tau - \tau'$. Выполняя фурье-преобразование (5.36) по этим разностям, находим

$$\begin{aligned}
 -G_{1c}(\vec{p}, \zeta_s) = & \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s_1} \left[-G_0(\vec{p}, \zeta_s) \right]^2 \times \\
 & \times \left[-G_0(\vec{p}_1, \zeta_{s_1}) \right] \left[-\nu \left(\frac{\vec{p} - \vec{p}_1}{\hbar} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{5.143}$$

Аналогично можно показать, что компонента Фурье второго слагаемого в формуле (5.137) равна

$$-G_{1d}(\vec{p}, \zeta_s) = \left[-G_0(\vec{p}, \zeta_s) \right]^2 \left[-\nu(0) \right] \sum_{\alpha_1} n_{\alpha_1}^0. \tag{5.144}$$

Поправкам (5.143) и (5.144) сопоставим диаграммы на рис. 5.6.

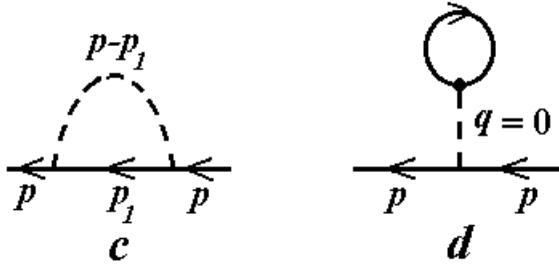


Рис. 5.6. Диаграммы для функций (5.143) и (5.144)

В p -представлении диаграммы для $-G(\vec{p}, \zeta_s)$ остаются такими же, как и в x -представлении. Только теперь входящие и выходящие электронные линии снабжены 4-импульсом $p = (\vec{p}, \zeta_s)$. Тонкой сплошной линии сопоставляем функцию $-G_0(\vec{p}, \zeta_s)$, штриховой $[-v(\vec{q})]$, а петле с одной вершиной – плотность электронов n_0 с обеими ориентациями спина. В каждой вершине выполняется «закон сохранения» 4-импульса:

$$\sum_i \vec{p}_i = 0, \quad \sum_i s_i = 0. \quad (5.145)$$

Индекс i нумерует линии, входящие в вершину и выходящие из нее. По «немым» индексам \vec{p}_1 и s_1 выполняем интегрирование и суммирование по правилу:

$$\int \frac{d^3 p_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s_1=-\infty}^{\infty} \cdot$$

В каждой вершине производится суммирование по паре немых спиновых индексов – по одному от каждой из соседних функций G_0 . Правило знаков остается таким же, как и в координатном представлении.

5.13. Собственно-энергетическая функция

Представив функцию Грина системы взаимодействующих электронов в виде ряда по степеням электрон-электронного взаимодействия, мы приходим к необходимости просуммировать бесконечное число членов этого ряда. Эта процедура эквивалентна суммированию диаграмм Фейнмана. Она упрощается введением собственно-энергетической функции.

Диаграммы для функции Грина можно отнести к одному из двух типов. К первому типу относятся диаграммы, которые нельзя разделить на две части путем разрыва лишь одной внутренней сплошной линии. К этому типу относятся диаграммы на рис. 5.5 (*a-e*) и на рис. 11.6. Диаграммы на рис. 5.5 (*f-j*) относятся ко второму типу. Их можно превратить в более простые диаграммы путем разрыва одной внутренней электронной линии. Суммируя слагаемые в функции Грина, соответствующие диаграммам первого типа, мы можем множитель $[-G_0(p)]^2$, соответствующий входящей и выходящей электронным линиям, вынести за скобки. Тогда в скобках останется некий множитель, который называется собственно-энергетической функцией или массовым оператором. Графически он изображается суммой всех диаграмм первого типа без входящей и выходящей электронных линий. Такие диаграммы называются неприводимыми. Диаграммы второго типа приводимы. На рис. 5.7 показано несколько диаграмм для собственно-

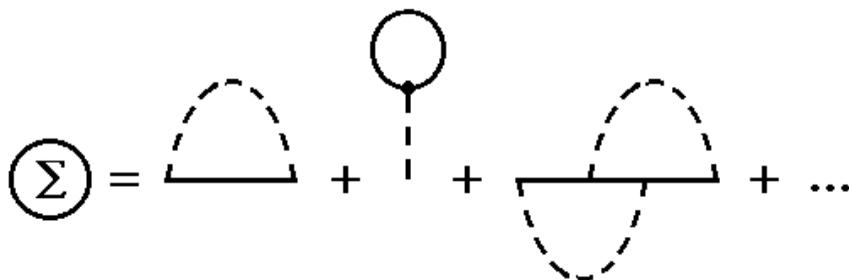


Рис. 5.7. Диаграммы для собственно-энергетической функции

энергетической функции. Она обозначена буквой $\Sigma(p)$ и изображена кружочком.

Если точной функции Грина G сопоставить двойную линию, ряд теории возмущений для нее графически будет представлен диаграммами на рис. 5.8. Первое слагаемое в правой части изображает G_0 . Второе слагаемое

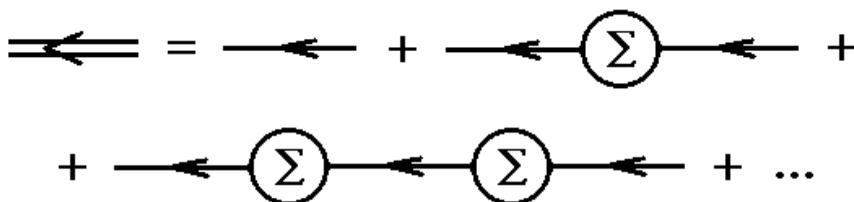


Рис. 5.8. Диаграммы для точной функции Грина

представляет собой сумму всех неприводимых диаграмм. В третьем слагаемом просуммированы все приводимые диаграммы, которые можно разделить на две неприводимые разрывом одной внутренней электронной линии и т. д. Используя правила соответствия, рассмотренные в р. 5.6, получим для суммы на рис. 5.8 выражение

$$\begin{aligned}
-G &= -G_0 + (-G_0)(-\Sigma)(-G_0) + \\
&+ (-G_0)(-\Sigma)(-G_0)(-\Sigma)(-G_0) + \dots = \\
&= -G_0 + (-G_0)(-\Sigma) \left[-G_0 + (-G_0)(-\Sigma)(-G_0) + \dots \right] = \\
&= -G_0 + (-G_0)(-\Sigma)(-G).
\end{aligned}$$

Мы получили уравнение Дайсона

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G, \quad (5.146)$$

связывающее функцию G с G_0 и Σ . Из этого уравнения следует

$$G(\vec{p}, \zeta_s) = \frac{1}{G_0^{-1}(\vec{p}, \zeta_s) - \Sigma(\vec{p}, \zeta_s)} = \frac{1}{i\zeta_s - \xi_{\vec{p}} - \Sigma(\vec{p}, \zeta_s)}. \quad (5.147)$$

Таким образом, для вычисления функции Грина G необходимо получить Σ .

Среди диаграмм для Σ выделим те, в которых одна штриховая линия присоединяется к входящей и выходящей линиям. Обозначим сумму таких диаграмм Σ_a (рис. 5.9). Сумму остальных диаграмм обозначим Σ_b .

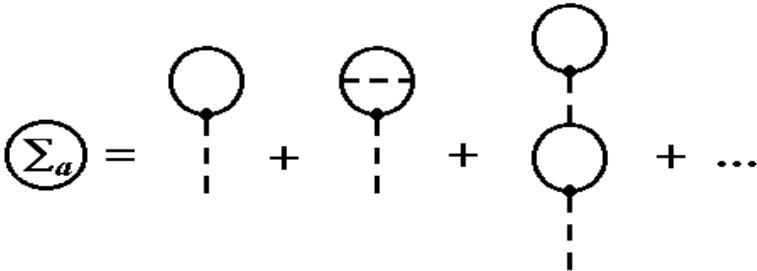


Рис. 5.9. Диаграммы для вклада Σ_a в собственно-энергетическую функцию

Из рис. 5.9 видно, что суммирование частей диаграмм без внешней штриховой линии эквивалентно удвоению петли, показанному на рис. 5.10.

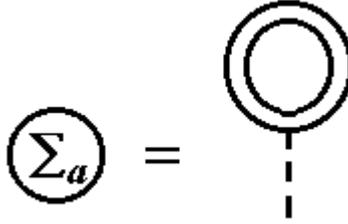


Рис. 5.10. Графическое суммирование диаграмм на рис. 5.9

Двойной петле соответствует точное выражение для плотности электронов $n(\mu, T)$. В результате

$$\Sigma(p) = v(0)n + \Sigma_b(p). \quad (5.148)$$

Процедура вычисления Σ свелась к суммированию бесконечной совокупности диаграмм для Σ_b . Аналитическое продолжение функции (5.147) с дискретных точек $i\zeta_s$ на верхнюю полуплоскость комплексной энергии дает запаздывающую функцию Грина G^+ , содержащую запаздывающую собственно-энергетическую функцию $\Sigma^+(\vec{p}, \varepsilon)$. Она имеет как вещественную Σ' , так и мнимую $-\gamma$ части: $\Sigma^+ = \Sigma' - i\gamma$. В результате

$$G^+(\vec{p}, \varepsilon) = \left[\varepsilon - \xi_{\vec{p}} - \Sigma'(\vec{p}, \varepsilon) + i\gamma(\vec{p}, \varepsilon) \right]^{-1}.$$

Спектральная плотность (5.57) равна

$$\rho(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \gamma(\vec{p}, \varepsilon) \left\{ \left[\varepsilon - \xi_{\vec{p}} - \Sigma'(\vec{p}, \varepsilon) \right]^2 + \gamma^2(\vec{p}, \varepsilon) \right\}^{-1},$$

а плотность электронных состояний в объеме V с данной ориентацией спина σ равна

$$v_{\sigma}(\varepsilon) = \sum_{\vec{p}} \rho_{\sigma}(\vec{p}, \varepsilon).$$

Если величина γ мала, спектральная плотность функции Грина имеет лоренцевский пик при $\varepsilon = \xi_{\vec{p}}^*$, где $\xi_{\vec{p}}^*$ – энергия, перенормированная за счет взаимодействия. Она удовлетворяет уравнению

$$\xi_{\vec{p}}^* = \xi_{\vec{p}} + \Sigma'(\vec{p}, \xi_{\vec{p}}^*).$$

Разложение $\varepsilon - \xi_{\vec{p}} - \Sigma'$ вблизи этой энергии дает

$$G^+(\vec{p}, \varepsilon) \approx \frac{Z_{\vec{p}}}{\varepsilon - \xi_{\vec{p}}^* + i\gamma_{\vec{p}}^*},$$

где

$$Z_{\vec{p}}^{-1} = \left[1 - \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \Sigma'(\vec{p}, \varepsilon) \right]_{\varepsilon = \xi_{\vec{p}}^*},$$

$$\frac{\hbar}{\tau_{\vec{p}}} = Z_{\vec{p}} \gamma(\vec{p}, \xi_{\vec{p}}^*).$$

Функция G^+ имеет полюс в точке $\xi_{\vec{p}}^* - i\gamma_{\vec{p}}^*$. Величина $\xi_{\vec{p}}^*$ равна энергии квазичастицы в системе, а $\gamma_{\vec{p}}^*$ – ее затухание (см. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Статистическая физика, ч. 2, 2000).

5.14. Приближение Хартри-Фока

К сожалению, просуммировать все диаграммы, входящие в Σ_b , для реальной системы взаимодействующих частиц невозможно. Заметный прогресс в теории систем многих частиц был достигнут лишь путем выборочного суммирования определенной совокупности диаграмм, существенных в данной задаче. Здесь мы рассмотрим простейший пример такого суммирования.

В разложении Σ ограничимся диаграммами на рис. 5.11. Такая аппроксимация называется приближением

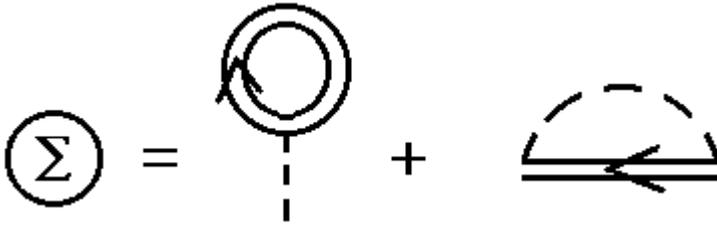


Рис. 5.11. Собственно-энергетическая функция в приближении Хартри-Фока

Хартри-Фока. Первое слагаемое на рис. 5.11 обусловлено прямым межчастичным взаимодействием, а второе – обменным. Двойная линия во втором слагаемом означает, что между актами взаимодействия частица движется в поле остальных частиц.

Используя правила соответствия, запишем сумму на рис. 5.11 в аналитическом виде

$$\Sigma(\vec{p}) = v(0)n - \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s'=-\infty}^{\infty} G(\vec{p}', \zeta_{s'}) v\left(\frac{\vec{p} - \vec{p}'}{\hbar}\right), \quad (5.149)$$

где \vec{p}' и $\zeta_{s'}$ – импульсная и энергетическая переменные, сопоставляемые двойной линии во втором слагаемом на рис. 5.11. Функция (5.149) в рассматриваемом приближении не зависит от ζ_s . Входящая в (5.149) сумма связана с функцией распределения частиц f соотношением (5.104). Следовательно,

$$\Sigma(\vec{p}) = \nu(0)n - \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{p}') \nu\left(\frac{\vec{p} - \vec{p}'}{\hbar}\right). \quad (5.150)$$

Из уравнения Дайсона (5.147) следует, что функция Грина в приближении Хартри-Фока совпадает со свободной функцией Грина (5.89)

$$G(\vec{p}, \zeta_s) = (i\zeta_s - E_{\vec{p}})^{-1}, \quad (5.151)$$

но теперь зависимость энергии «частицы» от импульса $E_{\vec{p}}$ становится более сложной:

$$E_{\vec{p}} = \xi_{\vec{p}} + \nu(0)n - \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} f(\vec{p}') \nu\left(\frac{\vec{p} - \vec{p}'}{\hbar}\right). \quad (5.152)$$

Мы пришли к картине независимых «частиц» с законом дисперсии (5.152), идеальный газ которых имитирует систему взаимодействующих частиц. Такие «частицы» называются квазичастицами. Их спектр совпал с полюсом аналитического продолжения функции (5.151) с дискретных точек $z_s = i\zeta_s$ на плоскость комплексной энергии. Этот результат справедлив и в более сложных случаях. Полюс, как правило, оказывается комплексным: $E_{\vec{p}} - i\gamma_{\vec{p}}$. Величина $\gamma_{\vec{p}}$ обуславливает затухание квазичастиц в системе взаимодействующих частиц. Из формулы (5.152) видно, что в приближении Хартри-Фока затухание отсутствует.

Понятие квазичастицы – одно из важнейших в статистической физике. Ее можно наглядно представлять себе как частицу, окруженную облаком других частиц. Например, в системе электронов на фоне положительного заряда электрон отталкивает от себя другие электроны. В результате положительный фон «оголяется», так что вокруг электрона

образуется облако положительного заряда, которое следует за ним. Положительный заряд экранирует заряд электрона, уменьшая его взаимодействие с другими электронами.

Используя результаты р. 5.9 и формулу (5.151), убеждаемся в том, что функция распределения f равна

$$f(\vec{p}) = \left(e^{\beta E_{\vec{p}}} + 1 \right)^{-1}. \quad (5.153)$$

Величины $E_{\vec{p}}$ и $f(\vec{p})$ могут быть определены из уравнений (5.152) и (5.153), которые необходимо решать совместно. Применим эти уравнения к вырожденному электронному газу.

Компонента Фурье энергии кулоновского взаимодействия электронов при $q = 0$ обращается в бесконечность. Однако, слагаемое $v(0)n$ в (5.152) можно не учитывать, так как оно компенсируется равномерно «размазанным» положительным зарядом, который обеспечивает электрическую нейтральность системы. Чтобы убедиться в этом, запишем гамильтониан электрон-электронного взаимодействия в виде

$$V = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{q}} v(\vec{q}) a_{(\vec{k}_1 + \vec{q})\sigma_1}^{\dagger} a_{\vec{k}_2 \sigma_2}^{\dagger} a_{(\vec{k}_2 + \vec{q})\sigma_2} a_{\vec{k}_1 \sigma_1}. \quad (5.154)$$

Если воспользоваться перестановочными соотношениями (2.107), слагаемое с $q = 0$ в формуле (5.154) окажется равным

$$\frac{1}{2V} v(0) (N^2 - N), \quad (5.155)$$

где

$$N = \sum_{\vec{k} \sigma} a_{\vec{k} \sigma}^{\dagger} a_{\vec{k} \sigma}$$

– оператор числа электронов. Собственное значение оператора (5.155) равно

$$\frac{N^2}{2V^2} \int d^3r \int d^3r' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (5.156)$$

где учтено $N \gg 1$, а нулевая компонента Фурье функции $\nu(r) = e^2/r$ записана в виде

$$\nu(0) = \frac{1}{V} \int d^3r \int d^3r' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

Выражение (5.156) совпадает с энергией статического однородно распределенного в объеме V отрицательного заряда. Точно такой же энергией обладает и положительный заряд. К ней необходимо добавить энергию взаимодействия электронов с фоном положительного заряда. Она в два раза больше величины (5.156) и отличается от нее знаком. Следовательно, эти три слагаемые в выражении для энергии компенсируются.

При нулевой температуре распределение (5.153) превращается в ступеньку Ферми, а обменный вклад в энергию квазичастицы (5.152) оказывается равным

$$\begin{aligned} E_{exch}(p) &= - \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{(\vec{p} - \vec{p}')^2} \Theta(p_F - p) = \\ &= - \frac{e^2 p_F}{\pi\hbar} \left(1 + \frac{p_F^2 - p^2}{2p_F p} \ln \left| \frac{p + p_F}{p - p_F} \right| \right), \end{aligned} \quad (5.157)$$

где p_F – импульс Ферми, а Θ – функция Хевисайда. Можно показать, что обменная энергия вырожденного электронного газа в приближении Хартри-Фока равна

$$E_{exch} = - \frac{3e^2 p_F}{4\pi\hbar} N, \quad (5.158)$$

где N – полное число электронов в системе.

Рассмотрим вклад хартриевского слагаемого $\nu(0)n$ в давление газа нейтральных частиц, подчиняющихся законам классической механики. В этом приближении обменный вклад в энергию (5.152) отсутствует. Используя известное термодинамическое тождество, представим производную давления P по химическому потенциалу в виде

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \mu}\right)_{V,T} = n(T, \mu),$$

где n – плотность газа. При фиксированной температуре отсюда получаем

$$dP = nd\mu. \quad (5.159)$$

Для вычисления плотности воспользуемся распределением Максвелла-Больцмана:

$$n = e^{\beta[\mu - \nu(0)n]} \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}.$$

Дифференцируя это соотношение при постоянной температуре и учитывая (5.159), получаем

$$dP = kTdn + \frac{1}{2}\nu(0)d(n^2).$$

После интегрирования этого уравнения находим

$$\left[P - \frac{1}{2}\nu(0)n^2 \right] = nkT,$$

где учтено $P = 0$ при $n = 0$. Мы получили уравнение Ван-дер-Ваальса, в котором собственные размеры частиц не учтены. Постоянная a , учитывающая взаимодействие частиц, равна

$$a = -\frac{1}{2}v(0) = 2\pi \int_0^{\infty} dr r^2 |v(r)|,$$

если частицы слабо притягиваются друг к другу на любом расстоянии r .

5.15. Эффективное взаимодействие. Поляризационный оператор

Диаграммы для собственно-энергетической функции можно упростить, если ввести понятие эффективного взаимодействия частиц. Для этого рассмотрим штриховые линии на рис. 5.5, 5.6. Видно, что можно выделить части диаграмм, содержащих одну входящую и одну выходящую штриховые линии. Их можно вычислять самостоятельно, используя полученные в р. 5.6 правила соответствия, а затем вставлять в диаграммы для функции Грина или собственно-энергетической функции. Диаграммы, содержащие одну входящую и одну выходящую штриховые линии взаимодействия, называются поляризационными диаграммами. Их сумма называется эффективным потенциалом взаимодействия. Изображая его двойной штриховой линией, получаем для этой суммы диаграммы на рис. 5.12.

неприводимые поляризационные части. Поляризационные части диаграмм f, j приводимые. Сумма всех неприводимых поляризационных частей называется поляризационным оператором. Обозначим его буквой Π и изобразим его фигурой Π на рис. 5.13. Здесь показано несколько диаграмм для

$$\begin{aligned}
 -\Pi(\vec{q}, \omega_n) &= \text{Diagram } \Pi = \text{Diagram 1} + \\
 &+ \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots
 \end{aligned}$$

Рис. 5.13. Диаграммы для поляризационного оператора

Как и в р. 5.7, поляризационный оператор позволяет представить ряд на рис. 5.12 в виде

$$\begin{aligned}
&= = = = - - - - + - - - \text{---} \Pi \text{---} - - - - + \\
&+ - - - - \text{---} \Pi \text{---} - - - - \text{---} \Pi \text{---} - - - - + \dots = \\
&= - - - - + - - - - \text{---} \Pi \text{---} \times \\
&\times \left(- - - - + - - - - \text{---} \Pi \text{---} - - - - + \dots \right) = \\
&= - - - - + - - - - \text{---} \Pi \text{---} = = = .
\end{aligned}$$

Сопоставляя отдельным членам этого ряда аналитические выражения, получаем

$$-V_{eff} = -\nu + (-\nu)(-\Pi)(-V_{eff}). \quad (5.160)$$

Отсюда следует

$$V_{eff}(\vec{q}, \omega_n) = \frac{\nu(\vec{q})}{\varepsilon(\vec{q}, \omega_n)}, \quad (5.161)$$

где

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega_n) = 1 - \nu(\vec{q})\Pi(\vec{q}, \omega_n). \quad (5.162)$$

Формулы (5.160) и (5.161) связывают эффективное взаимодействие с взаимодействием изолированных частиц ν и с поляризационным оператором. Функция (5.162), определенная для четных мацубаровских частот, называется мацубаровской диэлектрической функцией. Ее аналитическое продолжение с дискретного множества точек на верхнюю полуплоскость комплексной частоты дает запаздывающую функцию

$$\varepsilon^+(\vec{q}, \omega) = 1 - \nu(\vec{q})\Pi^+(\vec{q}, \omega), \quad (5.163)$$

регулярную в верхней полуплоскости. Она представляет собой частный случай обобщенной восприимчивости. Формула (5.161) описывает ослабление кулоновского взаимодействия электронов в среде, обусловленное ее поляризацией кулоновским полем. По этой причине эффективный потенциал (5.161) называется экранированным потенциалом.

Используя эффективный потенциал, можно упростить ряд для собственно-энергетической части. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим первую диаграмму на рис. 5.7 для собственно-энергетической части. В разложении Σ наряду с этой диаграммой имеются и такие, которые отличаются от нее заменой штриховой линии на что-то более сложное. Штриховая линия может быть усложнена так, как показано на рис. 5.12. Суммируя все такие диаграммы, получим диаграмму на рис. 5.14, которая отличается от исходной заменой



Рис. 5.14. Процедура удвоения штриховой линии в диаграмме для Σ

одинарной штриховой линии двойной. В соответствующем аналитическом выражении «голое» взаимодействие $v(\vec{q})$ необходимо заменить экранированным. Это относится ко всем линиям взаимодействия. Тогда мы получим более простой ряд для Σ , в котором линии взаимодействия (двойные) явно не содержат поляризационных частей. Это можно проделать и со сплошными линиями частиц на диаграммах. При этом вместо тонких линий появятся двойные. Они не будут явно содержать собственно-энергетических вставок. Простейшие такие диаграммы для Σ показаны на рис. 5.15.

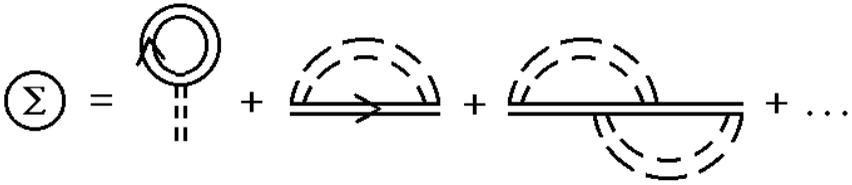


Рис. 5.15. Удвоение штриховых линий в диаграммах для Σ

5.16. Приближение хаотических фаз

Заменяем поляризационный оператор простой петлей на рис. 5.16.

$$-\Pi(\vec{q}, \omega_n) = \begin{array}{c} \vec{p}, \zeta_s \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \vec{p} - \hbar \vec{q}, \zeta_s - \hbar \omega_n \end{array} .$$

Рис. 5.16. Простая петля

Такая аппроксимация называется приближением хаотических фаз. Оно хорошо «работает» в пределе высоких плотностей n электронов, когда $na_0^3 \gg 1$. Здесь a_0 – боровский радиус. В этом приближении средняя кинетическая энергия электрона $\sim \hbar^2 n^{2/3} / m$ велика по сравнению со средней энергией кулоновского взаимодействия двух электронов $\sim e^2 n^{1/3}$,

находящихся на расстоянии $\sim n^{-1/3}$ друг от друга. В этом приближении эффективное взаимодействие изображается бесконечной совокупностью кольцевых диаграмм b, f, j, \dots на рис. 5.12.

Используя правила соответствия, получаем для диаграммы на рис. 5.16 выражение

$$\Pi(\vec{q}, \omega_n) = 2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{s=-\infty}^{\infty} G_0(\vec{p}, \zeta_s) G_0(\vec{p} - \hbar\vec{q}, \zeta_s - \hbar\omega_n), \quad (5.164)$$

где G_0 – функция Грина свободных электронов (5.89). Для вычисления входящей сюда суммы по нечетным мацубаровским частотам рассмотрим интеграл

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{(e^{\beta z} + 1)(z - \xi_{\vec{p}})(z - i\hbar\omega_n - \xi_{\vec{p} - \hbar\vec{q}})}$$

по окружности C большого радиуса, проходящей между полюсами функции Ферми в точках $i\zeta_s$. В пределе бесконечного радиуса окружности этот интеграл равен нулю. С другой стороны, он равен сумме вычетов подынтегральной функции в простых полюсах $i\zeta_s$, $\xi_{\vec{p}}$, $i\hbar\omega_n + \xi_{\vec{p} - \hbar\vec{q}}$. Следовательно,

$$\frac{1}{\beta} \sum_s G_0(\vec{p}, \zeta_s) G_0(\vec{p} - \hbar\vec{q}, \zeta_s - \hbar\omega_n) = \frac{f(\xi_{\vec{p}}) - f(\xi_{\vec{p} - \hbar\vec{q}})}{\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p} - \hbar\vec{q}} - i\hbar\omega_n},$$

где f – функция Ферми. Здесь учтено $\exp(i\beta\hbar\omega_n) = 1$. Поляризационный оператор в приближении хаотических фаз равен

$$\Pi(\vec{q}, \omega_n) = 2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{f(\xi_{\vec{p}}) - f(\xi_{\vec{p} - \hbar\vec{q}})}{\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p} - \hbar\vec{q}} - i\hbar\omega_n}. \quad (5.165)$$

Процедура аналитического продолжения этой функции на верхнюю полуплоскость комплексной частоты с последующим

переходом на вещественную ось сводится к тривиальной замене $i\hbar\omega_n \rightarrow \hbar\omega + i0$. В результате мы получаем запаздывающие функции Π^+ и ε^+ (5.163) в приближении хаотических фаз. Функция Π^+ вырожденного электронного газа в этом приближении вычислена в Приложении 2.

5.17. Плазмоны

Из формулы (5.161) видно, что эффективный потенциал V_{eff} в отсутствие «голового» потенциала ν отличен от нуля лишь в том случае, когда диэлектрическая функция ε обращается в нуль. Это означает, что уравнение

$$\varepsilon^+(\vec{q}, \omega) = 1 - \nu(\vec{q})\Pi^+(\vec{q}, \omega) = 0 \quad (5.166)$$

определяет частоту ω собственных колебаний плотности и других величин электронного газа как функцию волнового вектора \vec{q} . Эти колебания распространяются и после удаления источника, возбудившего их. Соответствующие волны называются плазменными, а кванты этих волн – плазмонами. Уравнение (5.166) для спектра плазмонов называется дисперсионным уравнением.

Из символического тождества

$$\frac{1}{x \pm i0} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

(P – символ главного значения), справедливого под знаком интеграла, видно, что функции Π^+ и ε^+ комплексные. Поэтому решение дисперсионного уравнения (5.166) также комплексное:

$$\omega = \Omega_q - i\gamma_q. \quad (5.167)$$

Подставляя это решение в $\exp(-i\omega t)$, получаем

$$\exp(-i\Omega_q t)\exp(-\gamma_q t).$$

Следовательно, Ω_q представляет собой закон дисперсии плазменной волны, а γ_q – ее затухание. Плазменные волны затухают слабо, если $\gamma_q \ll \Omega_q$.

Подставим (5.167) в дисперсионное уравнение (5.166) и выполним разложение Π^+ в ряд по степеням γ/Ω . Тогда, приравнявая нулю вещественную и мнимую части, находим

$$1 - \nu_q \operatorname{Re} \Pi^+(q, \Omega_q) = 0 \quad (5.168)$$

– уравнение для спектра плазменных волн,

$$\gamma_q = \frac{\operatorname{Im} \Pi^+(q, \Omega_q)}{\frac{\partial}{\partial \Omega_q} \operatorname{Re} \Pi^+(q, \Omega_q)} \quad (5.169)$$

– их затухание. Формулы (5.168) и (5.169) справедливы и за пределами приближения хаотических фаз.

Получим спектр плазмонов в вырожденном электронном газе в приближении хаотических фаз. Сдвигая переменную интегрирования в (5.165) и учитывая $\xi_{-\bar{p}} = \xi_{\bar{p}}$, представим вещественную часть функции Π^+ в виде

$$\operatorname{Re}\Pi^+(\vec{q}, \omega) = 2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\xi_{\vec{p}}) \mathcal{P} \frac{2(\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}-\hbar\vec{q}})}{(\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}-\hbar\vec{q}})^2 - (\hbar\omega)^2}. \quad (5.170)$$

Отметим, что предельное значение этой функции $\operatorname{Re}\Pi^+(0, 0)$ зависит от порядка предельного перехода $q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$. Если $\left(\frac{qp}{m}\right) \ll \omega$ ($\frac{p}{m}$ – скорость электрона), подынтегральную функцию в (5.170) можно разложить в ряд по степеням q . Оставляя главный член, получаем

$$\operatorname{Re}\Pi^+(q, \omega) \approx \frac{nq^2}{m\omega^2}, \quad (5.171)$$

где

$$n = 2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\xi_{\vec{p}})$$

– плотность электронов. Подставляя выражение (5.171) в уравнение (5.168), получаем плазменную частоту

$$\Omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m}}. \quad (5.172)$$

Можно показать, что с учетом следующего члена разложения (5.170) по степеням q спектр плазмонов в вырожденном электронном газе в длинноволновом приближении $q\nu_F \ll \Omega_0$ (ν_F – фермиевская скорость электрона) определяется формулой

$$\Omega_q^2 = \Omega_0^2 + \frac{3}{5} q^2 \nu_F^2.$$

График этой зависимости показан на рис. 5.17. Затухание

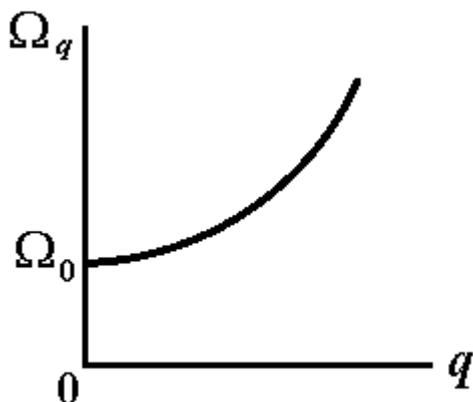


Рис. 5.17. Спектр плазменных волн

плазмонов при $T = 0$ отлично от нуля в заштрихованной на рис. 5.18 области на плоскости (q, ω) . Эта область ограничена

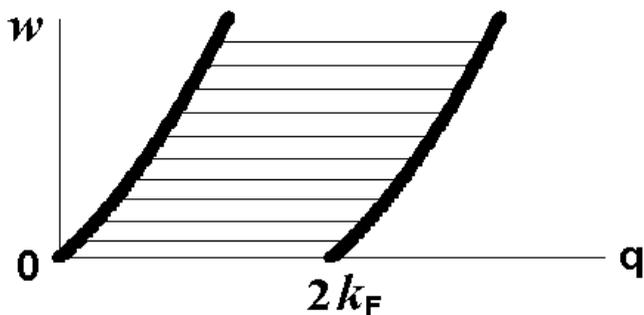


Рис. 5.18. Область бесстолкновительного затухания плазменных волн при $T = 0$

параболами

$$\pm qv_F + \frac{\hbar q^2}{2m}$$

и отрезком $[0, 2k_F]$ оси q . Здесь k_F – волновое число электрона на сфере Ферми.

Рассмотрим плазмоны в больцмановском электронном газе. Подставим в формулу (5.165) функцию распределения Максвелла-Больцмана. Получающийся при этом интеграл по импульсному пространству удобно вычислять в цилиндрических координатах с осью p_z вдоль вектора \vec{q} . Вектор \vec{p} представим в виде

$$\vec{p} = \vec{p}_\perp + p_\parallel \frac{\vec{q}}{q},$$

где вектор \vec{p}_\perp лежит в плоскости, перпендикулярной \vec{q} , а p_\parallel – проекция вектора \vec{p} на направление \vec{q} . Тогда

$$p^2 = p_\perp^2 + p_\parallel^2, \quad (\vec{p} - \hbar\vec{q})^2 = p_\perp^2 + (p_\parallel - \hbar q)^2.$$

После несложных вычислений получаем

$$\begin{aligned} \text{Re } \Pi^+(q, \omega) = & -\frac{n}{\hbar q} \sqrt{\frac{m\beta}{2}} \left\{ \Phi \left[\sqrt{\frac{m\beta}{2}} \left(\frac{\omega}{q} + \frac{\hbar q}{2m} \right) \right] - \right. \\ & \left. - \Phi \left[\sqrt{\frac{m\beta}{2}} \left(\frac{\omega}{q} - \frac{\hbar q}{2m} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.173)$$

$$\begin{aligned} \text{Im } \Pi^+(q, \omega) = & -\frac{n\beta\omega}{q} \sqrt{\frac{\pi m\beta}{2}} \frac{\text{sh} \frac{\beta\hbar\omega}{2}}{\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \times \\ & \times \exp \left[-\left(\frac{\beta m \omega^2}{2q^2} + \frac{\beta \hbar^2 q^2}{8m} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.174)$$

где

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \text{P} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-y^2}}{x-y}. \quad (5.175)$$

Функция (5.175) имеет асимптотики

$$\Phi(x) \approx \begin{cases} 2x \left(1 - \frac{2}{3}x^2\right), & x \ll 1, \\ \frac{1}{x} \left(1 + \frac{1}{2x^2}\right), & x \gg 1. \end{cases} \quad (5.176)$$

Подстановка выражений (5.173) и (5.174) в уравнения (5.168) и (5.169) с учетом (5.176) приводит к спектру

$$\Omega_q = \Omega_0 \left[1 + \frac{3}{2} \left(\frac{q}{q_D} \right)^2 \right]$$

и затуханию

$$\gamma_q = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \Omega_0 \left(\frac{q_D}{q} \right)^3 \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{q_D}{q} \right)^2 \right]$$

плазмонов в больцмановском электронном газе. В этих формулах предполагается, что $q \ll q_D$, где

$$q_D = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{kT}}$$

– дебаевское волновое число. Величина $r_D = q_D^{-1}$ называется дебаевским радиусом. Затухание γ_q плазменных волн в классической плазме получено впервые Л.Д. Ландау в 1946 году. Оно происходит в плазме без учета столкновений. Это явление получило название затухания Ландау.

5.18. Экранирование в вырожденном электронном газе

Рассмотрим задачу об экранировании статического поля пробного заряда в вырожденном электронном газе на фоне положительного компенсирующего заряда.

Поскольку речь идет о статическом экранировании, переменную ω в формуле (5.170) следует положить равной нулю. Тогда мы получим предельное значение Π^+ при $\omega \ll qp/m$, которое отличается от (5.171). Поскольку $\text{Im} \Pi^+(q, 0) = 0$ при конечном q (см. рис. 5.18), имеем

$$\Pi^+(q) = 2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{f(\xi_{\bar{p}}) - f(\xi_{\bar{p}-\hbar\bar{q}})}{\xi_{\bar{p}} - \xi_{\bar{p}-\hbar\bar{q}}}.$$

Если $q \ll k_F$, разность функций Ферми в этой формуле можно разложить в ряд по степеням q :

$$f(\xi_{\bar{p}}) - f(\xi_{\bar{p}-\hbar\bar{q}}) \approx (\xi_{\bar{p}} - \xi_{\bar{p}-\hbar\bar{q}}) \frac{\partial f}{\partial \xi_{\bar{p}}}.$$

Входящая сюда производная функции Ферми при нулевой температуре равна δ -функции. Следовательно,

$$\Pi^+(q) = -2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \delta(\varepsilon_{\bar{p}} - \varepsilon_F),$$

где ε_F – энергия Ферми. Учитывая формулу для плотности состояний, перепишем это выражение в виде

$$\Pi^+(q) = -\frac{2}{V} \nu(\varepsilon_F), \quad (5.177)$$

где $\nu(\varepsilon_F)$ – плотность одноэлектронных состояний на границе Ферми.

Подстановка выражения (5.177) в аналитическое продолжение экранированного потенциала (5.161) на вещественную ось частоты дает

$$V_{eff}(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_{FT}^2}. \quad (5.178)$$

Здесь мы учли компоненту Фурье $\nu_q = 4\pi e^2 / q^2$ кулоновского потенциала и ввели обозначение

$$q_{FT}^2 = \frac{6\pi e^2 n}{\varepsilon_F}.$$

Компоненте Фурье (5.178) соответствует энергия экранированного взаимодействия электронов на расстоянии r друг от друга:

$$V_{eff}(r) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_{FT}^2} e^{i\vec{q}\vec{r}}.$$

Этот интеграл равен

$$V_{eff}(r) = \frac{e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_{FT}}\right), \quad (5.179)$$

где

$$r_{FT} = \frac{1}{q_{FT}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_F}{6\pi e^2 n}}$$

– радиус экранирования Ферми-Томаса. Из формулы (5.179) видно, что при $q_{FT} = 0$ экранированный потенциал сводится к кулоновскому. Если же $r \gg r_{FT}$, взаимодействие двух электронов в среде экспоненциально мало.

5.19. Уравнения для функций Грина. Двухчастичная функция Грина

Полевые операторы, входящие в выражение (5.24) для одночастичной функции Грина, удовлетворяют уравнению (5.75). Коммутатор полевого оператора с гамильтонианом (5.23) вычисляется при помощи перестановочных соотношений (5.18). Это дает уравнение движения для полевого оператора:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \mu \right) \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau) + \\ &+ \sum_{\alpha_1} \int d^3 \vec{r}_1 v(|\vec{r} - \vec{r}_1|) \bar{\psi}_{\alpha_1}(\vec{r}_1, \tau) \psi_{\alpha_1}(\vec{r}_1, \tau) \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau). \end{aligned}$$

(5.180)

Чтобы получить уравнение для функции (5.24), необходимо продифференцировать ее по τ . Для этого представим хронологическое произведение операторов (5.25) в виде

$$T_{\tau} [\psi(\tau) \bar{\psi}(\tau')] = \Theta(\tau - \tau') \psi(\tau) \bar{\psi}(\tau') - \Theta(\tau' - \tau) \bar{\psi}(\tau') \psi(\tau),$$

где Θ – функция Хевисайда. Ее производная равна

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \Theta(\pm \tau \mp \tau') = \pm \delta(\tau - \tau').$$

В результате дифференцирования функции (5.24) получаем

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha\alpha'}(\vec{r}, \tau; \vec{r}', \tau') = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(\tau - \tau') + \left\langle T_{\tau} \left[\frac{\partial \psi_{\alpha}(\vec{r}, \tau)}{\partial \tau} \bar{\psi}_{\alpha'}(\vec{r}', \tau') \right] \right\rangle.$$

В первом слагаемом в правой части этого уравнения учтены перестановочные соотношения (5.18). Подставляя сюда производную (5.180), находим

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu \right) G_{\alpha\alpha'}(x, x') = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(x - x') - \sum_{\alpha_1} \int dx_1 V(|x - x_1|) \left\langle T_{\tau} \left[\bar{\psi}_{\alpha_1}(x_1) \psi_{\alpha_1}(x_1) \psi_{\alpha}(x) \bar{\psi}_{\alpha'}(x') \right] \right\rangle.$$

Здесь использованы сокращенные обозначения, введенные в р. 5.12. Последнее слагаемое в правой части этого уравнения обусловлено парным взаимодействием частиц. Оно содержит двухчастичную функцию Грина (5.37). Итак, уравнение для одночастичной функции Грина (5.24) содержит двухчастичную функцию Грина:

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu \right) G_{\alpha\alpha'}(x, x') = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(x - x') + \sum_{\alpha_1} \int dx_1 V(|x - x_1|) K_{\alpha_1\alpha, \alpha_1\alpha'}(x_1 x, x_1^+ x'). \quad (5.181)$$

Индекс + у третьего аргумента функции K означает, что в хронологическом произведении полевой оператор $\bar{\psi}_{\alpha_1}(x_1)$ должен стоять перед оператором $\psi_{\alpha_1}(x_1)$. Таким же способом можно получить уравнение для функции K . Оно будет содержать еще более сложную функцию Грина. Продолжая этот процесс, получим бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений для многочастичных функций Грина. Для обрыва этой цепочки необходима определенная аппроксимация.

Двухчастичная функция Грина (5.37) может быть записана в представлении взаимодействия так, как это было сделано для одночастичной функции Грина (5.130). Тогда и функция K может быть представлена в виде ряда по степеням энергии межчастичного взаимодействия. Отдельные слагаемые этого ряда могут быть вычислены при помощи теоремы Вика, рассмотренной в р. 5.8 и в Приложении 1. Каждому слагаемому в разложении K можно сопоставить диаграмму Фейнмана. В частности, в нулевом приближении мы получаем выражение (5.95), в котором $1 = (\alpha_1, \vec{r}_1, \tau_1), \dots$ Ему соответствуют диаграммы на рис. 5.19. Второе слагаемое на этом рисунке

$$K_0(34,12) = \begin{array}{c} 3 \longleftarrow 1 \\ 4 \longleftarrow 2 \end{array} + \begin{array}{c} 4 \longleftarrow 1 \\ 3 \longleftarrow 2 \end{array}$$

Рис. 5.19. Диаграммы для свободной двухчастичной функции Грина

получено из первого путем перестановки индексов 3 и 4. Поэтому соответствующее аналитическое выражение входит в K_0 со знаком минус. Это правило остается справедливым и в высших порядках теории возмущений.

Запишем уравнение (5.181) в p -представлении. Одночастичная функция Грина в этом представлении была

рассмотрена в р. 5.12. Прямое и обратное преобразования Фурье для функции K запишем в виде

$$\begin{aligned}
 K(34,12) &= \int dp_3 \int dp_4 \int dp_1 \int dp_2 \bar{K}(p_3 p_4, p_1 p_2) \times \\
 &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_3 x_3 + p_4 x_4 - p_1 x_1 - p_2 x_2) \right], \\
 \bar{K}(p_3 p_4, p_1 p_2) &= \int dx_3 \int dx_4 \int dx_1 \int dx_2 K(34,12) \times \\
 &\quad \times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p_3 x_3 + p_4 x_4 - p_1 x_1 - p_2 x_2) \right].
 \end{aligned} \tag{5.182}$$

Здесь $1 = (\bar{r}_1, \tau_1), \dots$,

$$\int dp = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\beta} \sum_s,$$

а спиновые индексы опущены. Как и в предыдущих разделах, мы ограничиваемся рассмотрением однородной равновесной ферми-жидкости. В такой системе четырехточечная функция K зависит от трех разностей: $x_3 - x_2$, $x_4 - x_2$, $x_1 - x_2$. С учетом тождества

$$\begin{aligned}
 p_3 x_3 + p_4 x_4 - p_1 x_1 - p_2 x_2 &= p_3 (x_3 - x_2) + p_4 (x_4 - x_2) - \\
 &- p_1 (x_1 - x_2) + (p_3 + p_4 - p_1 - p_2) x_2,
 \end{aligned}$$

переходя в (5.182) к интегрированию по $x_3 - x_2$, $x_4 - x_2$, $x_1 - x_2$, x_2 и используя формулу (5.141), представим компоненту Фурье \bar{K} в виде

$$\begin{aligned}
 \bar{K}(p_3 p_4, p_1 p_2) &= \delta(p_3 + p_4 - p_1 - p_2) \times \\
 &\quad \times K(p_3 p_4, p_1 (p_3 + p_4 - p_1)),
 \end{aligned} \tag{5.183}$$

где

$$\delta(p) = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}) \beta \delta_{s,0}.$$

В частности, компонента Фурье функции K_0 равна

$$\begin{aligned} K_{\alpha_3\alpha_4,\alpha_1\alpha_2}^0(p_3p_4,p_1p_2) &= \delta(p_1-p_3)G_{\alpha_3\alpha_1}^0(p_1) \times \\ &\times G_{\alpha_4\alpha_2}^0(p_2) - \delta(p_1-p_4)G_{\alpha_4\alpha_1}^0(p_1)G_{\alpha_3\alpha_2}^0(p_2), \end{aligned} \quad (5.184)$$

где $p_2 = p_3 + p_4 - p_1$. Это выражение изображается диаграммами на рис. 5.19, каждой линии которых сопоставлен четырехимпульс p . Например, на линии 31 $p_1 = p_3$. Тогда на линии 42 $p_2 = p_4$.

Формулы (5.31), (5.138) и (5.182) позволяют перейти в уравнении (5.181) к p -представлению:

$$\begin{aligned} (i\zeta_s - \xi_{\vec{p}})G_{\alpha\alpha'}(\vec{p},\zeta_s) &= \delta_{\alpha\alpha'} + \sum_{\alpha_1} \int dp_3 \int dp_4 \nu \left(\frac{\vec{p} - \vec{p}_4}{\hbar} \right) \times \\ &\times K_{\alpha_1\alpha,\alpha_1\alpha'}(p_3p_4,(p_3+p_4-p)p). \end{aligned} \quad (5.185)$$

Входящую сюда двухчастичную функцию Грина K выразим через вершинную функцию.

5.20. Вершинная функция

Правила соответствия между диаграммами и аналитическими выражениями, полученные в р. 5.12, применимы и к функции K . Только теперь необходимо рассматривать диаграммы с четырьмя внешними линиями, а не двумя, как в р. 5.12. Не следует рассматривать диаграммы, содержащие блоки, не связанные с линиями на рис. 5.19. Такие диаграммы получаются в результате спаривания полевых

операторов, входящих в температурный оператор рассеяния. Они компенсируются слагаемыми, полученными при разложении $\langle \sigma \rangle_0$ в знаменателе функции K .

В первом порядке теории возмущений по межчастичному взаимодействию появляются диаграммы, изображенные на рис. 5.20. Ясно, что дальнейшие поправки

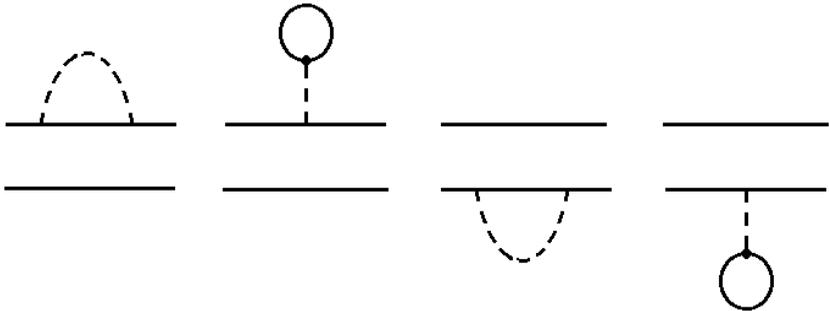


Рис. 5.20. диаграммы первого порядка для двухчастичной функции Грина

к линиям на этом рисунке приведут к диаграммам более высоких порядков. Суммирование таких диаграмм вместе с диаграммами на рис. 5.19 сводится к удвоению линий на этом рисунке. В результате вместо функций G_0 в формуле (5.95) появляются точные одночастичные функции Грина G . Полученные таким образом диаграммы описывают распространение двух пробных частиц, взаимодействующих со средой таких же частиц, но не между собой.

Взаимодействие двух пробных частиц между собой в первом порядке теории возмущений описывается диаграммами на рис. 5.21. Используя правила соответствия

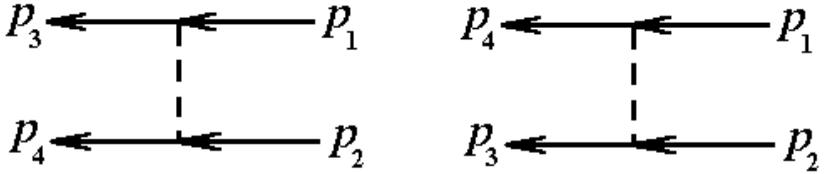


Рис. 5.21. Диаграммы для K , учитывающие взаимодействие между пробными частицами

(см. р. 5.12), находим вклад этих диаграмм в функцию $K_{34,12}$ в p -представлении:

$$\sum_{\beta_1 \dots \beta_4} [-G_{\alpha_3 \beta_3}(p_3)] [-G_{\beta_1 \alpha_1}(p_1)] [-G_{\alpha_4 \beta_4}(p_4)] \times \\ \times [-G_{\beta_2 \alpha_2}(p_2)] \Gamma_{\beta_3 \beta_4, \beta_1 \beta_2}^{(1)}(p_3 p_4, p_1 p_2),$$

где

$$\Gamma_{\beta_3 \beta_4, \beta_1 \beta_2}^{(1)}(p_3 p_4, p_1 p_2) = \left[-V \left(\frac{p_1 - p_3}{\hbar} \right) \right] \delta_{\beta_3 \beta_1} \delta_{\beta_4 \beta_2} - \\ - \left[V \left(\frac{p_1 - p_4}{\hbar} \right) \right] \delta_{\beta_4 \beta_1} \delta_{\beta_3 \beta_2},$$

$p_2 = p_3 + p_4 - p_1$. Величина $\Gamma^{(1)}$ представляет собой первый порядок теории возмущений для вершинной функции. Ей соответствуют штриховые линии на рис. 5.21. В высших порядках появляются поправки, образующие фигуру, заменяющую штриховые линии на рис. 5.21. Во втором приближении они изображаются диаграммами на рис. 5.22.

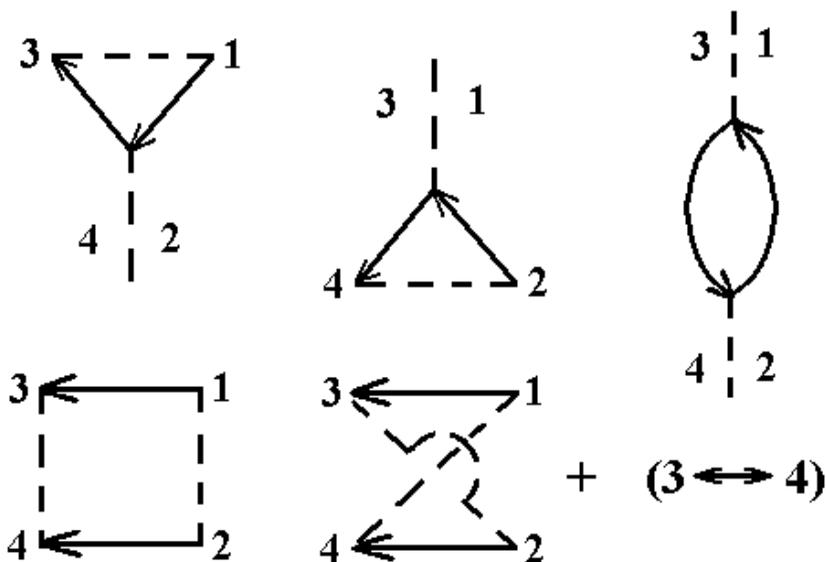


Рис. 5.22. Диаграммы второго порядка для вершинной функции

Здесь $(3 \leftrightarrow 4)$ – сумма диаграмм, которые получаются из предыдущих заменой индексов $3 \leftrightarrow 4$. Сумма диаграмм на рис. 5.22 дает вершинную функцию $\Gamma^{(2)}$ во втором порядке теории возмущений. Суммируя бесконечную последовательность диаграмм, которые заменяют штриховые линии на рис. 5.21, получаем точную вершинную функцию $\Gamma(34,12)$. Сопоставим ей квадрат на диаграммах.

Помимо диаграмм на рис. 5.20 и 5.21 в разложении K присутствуют диаграммы с собственно-энергетическими вставками в концевые линии на рис. 5.21. Учет таких вставок приводит к замене тонких внешних линий двойными. Таким образом, бесконечный ряд теории возмущений для функции K сводится всего к трем диаграммам на рис. 5.23.

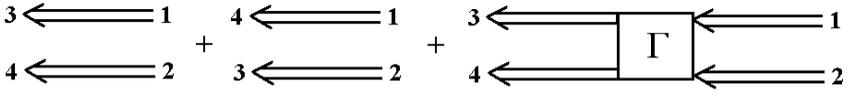


Рис. 5.23. Диаграммы для точной двухчастичной функции Грина

Соответствующее аналитическое выражение имеет вид

$$\begin{aligned}
 K_{\alpha_3\alpha_4,\alpha_1\alpha_2}(p_3p_4,p_1p_2) &= G_{\alpha_3\alpha_1}(p_1)G_{\alpha_4\alpha_2}(p_2) \times \\
 &\times \delta(p_3 - p_1) - G_{\alpha_4\alpha_1}(p_1)G_{\alpha_3\alpha_2}(p_2)\delta(p_4 - p_1) + \\
 &+ \sum_{\beta_1 \dots \beta_4} G_{\alpha_3\beta_3}(p_3)G_{\alpha_4\beta_4}(p_4)\Gamma_{\beta_3\beta_4,\beta_1\beta_2}(p_3p_4,p_1p_2) \times \\
 &\times G_{\beta_1\alpha_1}(p_1)G_{\beta_2\alpha_2}(p_2), \quad (5.186)
 \end{aligned}$$

где $p_2 = p_3 + p_4 - p_1$. Это уравнение связывает функции K , G и Γ . Аналогичное уравнение в квантовой электродинамике получено Г. Бете и Э. Солпитером в 1951 году.

Двухчастичную функцию Грина (5.186) подставим в уравнение (5.185) и учтем соотношения (5.102), (5.146) и (5.148). Тогда мы получим уравнение

$$\begin{aligned}
 \Sigma(p)\delta_{\alpha\alpha'} &= -\delta_{\alpha\alpha'} \int dp_1 V \left(\frac{p-p_1}{\hbar} \right) G(p_1) + \\
 &+ \sum_{\alpha_1} \int dp_3 \int dp_4 G(p_3)G(p_4)G(p_3+p_4-p) \times \\
 &\times \Gamma_{\alpha_1\alpha,\alpha_1\alpha'}(p_3p_4,(p_3+p_4-p)p) V \left(\frac{p-p_4}{\hbar} \right), \quad (5.187)
 \end{aligned}$$

связывающее функции G , Σ и Γ . Оно называется уравнением Дайсона. Это уравнение позволяет рассмотреть свойства нормальной ферми-жидкости методом функций Грина.

5.21. Каналы частица-дырка и частица-частица

Точно решить уравнения (5.185)-(5.187) для реальной системы взаимодействующих электронов невозможно. Обычно они решаются приближенно методом выборочного суммирования определенного класса диаграмм для вершинной функции. Таким методом были рассмотрены свойства электронных систем малой и большой плотности, построена теория нормальной ферми-жидкости Л.Д. Ландау, теория сверхпроводимости (А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, 1962; Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Статистическая физика, ч. 2, 2000). С целью дать краткое введение в эти проблемы рассмотрим здесь способы суммирования диаграмм для вершинной функции, на которых основаны теории нормальных и сверхпроводящих систем. Эти способы суммирования называются каналами (А.Б. Мигдал, Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, 1965; Ж.-П. Блейзо, Ж. Рипка, Квантовая теория конечных систем, 1998).

Рассмотрим двухэлектронную функцию Грина (5.37) в (k, τ) -представлении:

$$K(34,12) = \langle T_\tau (a_3 a_4 \bar{a}_2 \bar{a}_1) \rangle, \quad (5.188)$$

где теперь $l = (k_1, \tau_1), \dots, k$ – полный набор квантовых чисел частицы. Поскольку гамильтониан электронов H не зависит от τ , то функция (5.188) не зависит от суммы переменных $\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4$. С целью избавиться от этой зависимости введем новые переменные:

$$\begin{aligned}
x &= \tau_3 - \tau_1, \quad y = \tau_4 - \tau_2, \\
z &= \frac{1}{2}(\tau_3 + \tau_1 - \tau_4 - \tau_2), \quad u = \frac{1}{4}(\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4), \\
\varepsilon &= \frac{1}{2}(\zeta_3 + \zeta_1), \quad \varepsilon' = \frac{1}{2}(\zeta_4 + \zeta_2), \quad \omega = \frac{1}{2}(\zeta_3 - \zeta_1 - \zeta_4 + \zeta_2), \\
w &= \zeta_3 + \zeta_4 - \zeta_1 - \zeta_2.
\end{aligned} \tag{5.189}$$

Тогда фурье-разложение (5.182) примет вид

$$\begin{aligned}
K(34,12) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\varepsilon} \frac{1}{\beta} \sum_{\varepsilon'} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \frac{1}{\beta} \sum_w \bar{K}(k_3\varepsilon, k_4\varepsilon'; k_1\omega, k_2w) \times \\
&\quad \times \exp(-i\varepsilon\chi - i\varepsilon'y - i\omega z - iwu), \\
\bar{K}(k_3\varepsilon, k_4\varepsilon'; k_1\omega, k_2w) &= \int_0^{\beta} dx \int_0^{\beta} dy \int_0^{\beta} dz \int_0^{\beta} du K(k_3x, k_4y; k_1z, k_2u) \times \\
&\quad \times \exp(i\varepsilon x + i\varepsilon'y + i\omega z + iwu).
\end{aligned}$$

Поскольку K не зависит от u , имеем

$$\bar{K}(k_3\varepsilon, k_4\varepsilon'; k_1\omega, k_2w) = \beta \delta_{w,0} K(k_3k_4, k_1k_2, \varepsilon, \varepsilon', \omega),$$

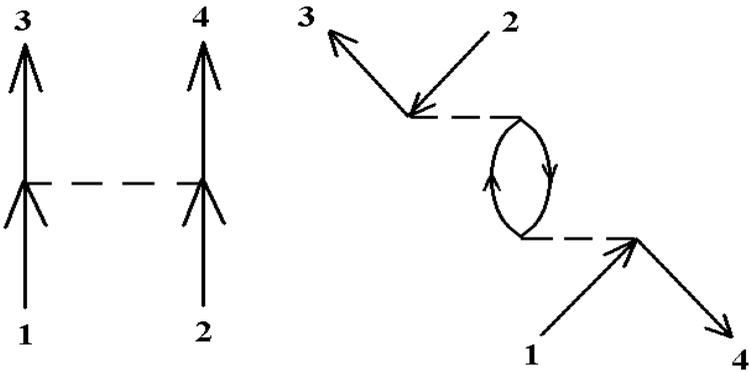
где

$$\begin{aligned}
K(\varepsilon, \varepsilon', \omega) &= \int_0^{\beta} dx \int_0^{\beta} dy \int_0^{\beta} dz K(x, y, z) \times \\
&\quad \times \exp(i\varepsilon x + i\varepsilon'y + i\omega z)
\end{aligned}$$

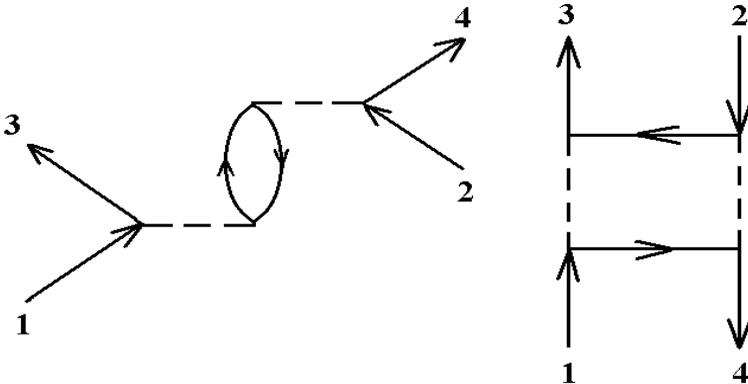
– редуцированная функция Грина (индексы k_i опущены).

С учетом $w = 0$ имеем $\omega = \zeta_2 - \zeta_4 = \zeta_3 - \zeta_1$. Величину $\zeta_2 - \zeta_4$ можно трактовать как энергию входящей пары частица-дырка, а $\zeta_3 - \zeta_1$ – как энергию выходящей пары.

Замена переменных (5.189) соответствует способу суммирования диаграмм для Γ , который называется каналом частица-дырка [31]. По определению диаграмма, дающая вклад в Γ , называется простой в канале частица-дырка [31], если разрезанием двух сплошных линий ее нельзя разделить на две несвязанные части так, чтобы одна часть содержала линии 3 и 1, а другая – линии 4 и 2. Например, диаграммы



простые в канале частица-дырка [31], а диаграммы



не являются простыми в рассматриваемом канале. Напомним, что функции G , соответствующие «хвостам» диаграмм, в Γ не входят. Сумму простых диаграмм, дающих вклад в Γ , обозначим Γ^{31} . Тогда полную вершину Γ можно получить

путем итераций Γ^{31} . В результате получаем интегральное уравнение для вершины:

$$\Gamma(34,12) = \Gamma^{31}(34,12) + \sum_{1'2'3'4'} \Gamma^{31}(34',12') G(1',4') G(2',3') \Gamma(3'4,1'2), \quad (5.190)$$

где $\sum_1 = \sum_{k_1} \int_0^\beta d\tau_1, \dots$. Графическое изображение этого уравнения показано на рис. 5.24.

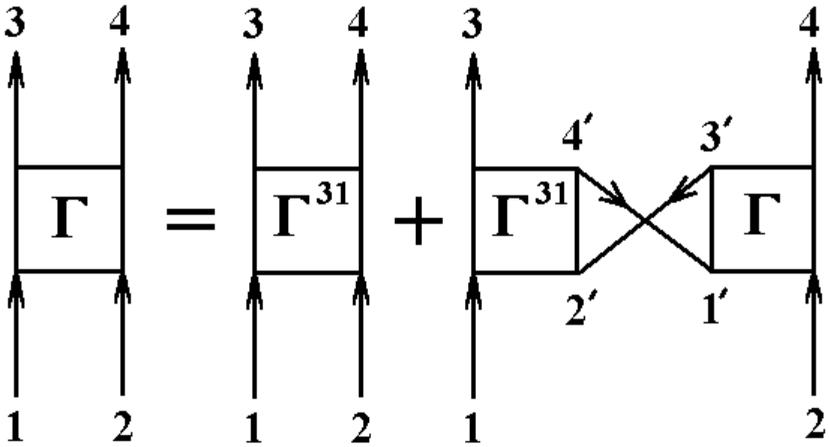


Рис. 5.24. Графическое изображение уравнения (5.190)

Аналогично определяется канал частица-дырка [32]. Читателю предлагается показать, что в этом канале

$$\Gamma(34,12) = \Gamma^{32}(34,12) - \sum_{1'2'3'4'} \Gamma^{32}(34',1'2')G(1',3')G(2',4')\Gamma(3'4,12'). \quad (5.191)$$

Здесь Γ^{32} – сумма простых диаграмм в канале частица-дырка [32], которые разрезанием двух внутренних сплошных линий не могут быть разделены на две несвязанные части так, чтобы одна часть содержала линии 3 и 2, а другая – линии 4 и 1.

Чтобы получить уравнение для Γ в канале частица-частица, перейдем в (5.188) к новым переменным

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \tau_3 - \tau_4, \quad \bar{y} = \tau_2 - \tau_1, \\ \bar{z} &= \frac{1}{2}(\tau_3 + \tau_4 - \tau_1 - \tau_2), \quad u = \frac{1}{4}(\tau_3 + \tau_4 + \tau_1 + \tau_2), \\ \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{2}(\zeta_3 - \zeta_4), \quad \bar{\varepsilon}' = \frac{1}{2}(\zeta_1 - \zeta_2), \quad \bar{\omega} = \frac{1}{2}(\zeta_3 + \zeta_4 + \zeta_1 + \zeta_2), \\ w &= \zeta_3 + \zeta_4 - \zeta_1 - \zeta_2. \end{aligned} \quad (5.192)$$

В этих переменных разложение (5.182) имеет вид

$$\begin{aligned} K(34,12) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\varepsilon}} \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\varepsilon}'} \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\omega}} \frac{1}{\beta} \sum_w \bar{K}(k_3\bar{\varepsilon}, k_4\bar{\varepsilon}'; k_1\bar{\omega}, k_2w) \times \\ &\quad \times \exp(-i\bar{\varepsilon}\bar{x} - i\bar{\varepsilon}'\bar{y} - i\bar{\omega}\bar{z} - iwu). \end{aligned}$$

Поскольку K не зависит от u , то

$$\bar{K}(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}', \bar{\omega}, w) = \beta \delta_{w,0} K(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}', \bar{\omega}),$$

где $K(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}', \bar{\omega})$ – редуцированная функция Грина в канале частица-частица [34]. Из $w = 0$ находим $\bar{\omega} = \zeta_1 + \zeta_2 = \zeta_3 + \zeta_4$.

Эту величину можно трактовать как суммарную энергию входящих в область взаимодействия частиц и выходящих из этой области частиц.

Для получения уравнения для Γ в канале частица-частица [34] снова определим простые диаграммы в этом канале. Диаграмма считается простой в канале частица-частица [34], если разрезанием по двум сплошным линиям ее нельзя разделить на две несвязанные части так, чтобы одна часть содержала линии 3 и 4, а другая – линии 1 и 2. Сумму простых диаграмм обозначим Γ^{34} . Тогда

$$\Gamma(34,12) = \Gamma^{34}(34,12) - \frac{1}{2} \sum_{1'2'3'4'} \Gamma^{34}(34,3'4')G(3',1')G(4',2')\Gamma(1'2',12). \quad (5.193)$$

Соответствующие этому уравнению диаграммы показаны на рис. 5.25.

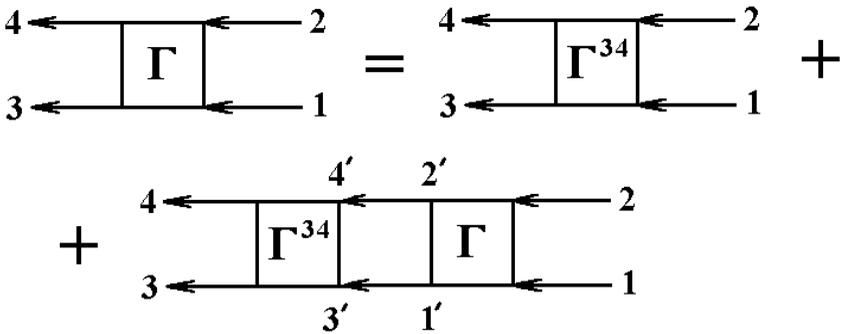


Рис. 5.25. Уравнение для Γ в канале частица-частица [34]

Уравнения (5.190), (5.191) и (5.193) лежат в основе микроскопической теории нормальных и сверхпроводящих ферми-систем.

5.22. Производящий функционал для функций Грина

В этом разделе мы покажем, как функции Грина системы взаимодействующих частиц могут быть получены функциональным дифференцированием некоторого функционала, который называется производящим функционалом. Для этого добавим к гамильтониану системы H слагаемые

$$\sum_k \left[\bar{a}_k(\tau) \varphi_k(\tau) + \varphi_k^*(\tau) a_k(\tau) \right], \quad (5.194)$$

линейные по операторам вторичного квантования. Здесь $a_k(\tau)$ и $\bar{a}_k(\tau)$ – мацубаровские операторы уничтожения и рождения частиц в состоянии k , φ_k и φ_k^* – комплексные числа или переменные Грассмана в зависимости от того, являются ли операторы a_k и \bar{a}_k бозонными или фермионными. Слагаемые (5.194) вводятся формально для генерации функций Грина и корреляционных функций. Величины φ и φ^* называются источниками бозевских или фермиевских частиц. В случае фермионов φ_k^* не рассматривается как комплексно сопряженная к φ_k величина, а является независимой переменной Грассмана. Величины φ и φ^* антикоммутируют между собой и с операторами вторичного квантования.

С учетом (5.194) гамильтониан системы становится равным

$$H_\varphi(\tau) = H + \sum_k \left[\bar{a}_k(\tau) \varphi_k(\tau) + \varphi_k^*(\tau) a_k(\tau) \right].$$

(5.195)

Соответствующий этому гамильтониану температурный оператор эволюции системы в поле источников равен (см. р. 5.10)

$$U_\varphi(\beta, 0) = T_\tau \exp \left[-\int_0^\beta d\tau H_\varphi(\tau) \right]. \quad (5.196)$$

Этот оператор функционально зависит от $\varphi_k(\tau)$ и $\varphi_k^*(\tau)$. Он позволяет ввести производящий функционал $Z[\varphi, \varphi^*]$ для функций Грина:

$$Z[\varphi, \varphi^*] = \text{Sp} U_\varphi(\beta, 0). \quad (5.197)$$

Представим этот функционал в виде континуального интеграла.

Процедура вывода континуального представления для функционала (5.197) аналогична рассмотренной в разделе 3. Только теперь гамильтониан (5.195) содержит источники φ и φ^* . Подставляя его в формулы (3.156) и (3.157), получаем

$$Z[\varphi, \varphi^*] = \int_{z(\beta)=-\eta z(0)} D(z^*, z) \exp[-S(z^*, z)], \quad (5.198)$$

$$S(z^*, z) = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_k \left[z_k^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} z_k(\tau) + z_k^*(\tau) \varphi_k(\tau) + \right. \right. \\ \left. \left. + \varphi_k^*(\tau) z_k(\tau) \right] + H(z^*, z) \right\}, \quad (5.199)$$

$$D(z^*, z) = \prod_{k\tau} \left[(2\pi i)^{(\eta-1)/2} dz_k^*(\tau) dz_k(\tau) \right]. \quad (5.200)$$

Напомним, что интеграл (5.198) вычисляется с учетом граничного условия (3.155). Функция $H(z^*, z)$ получается из оператора $H(\bar{a}, a)$ заменой $\bar{a} \rightarrow z^*$, $a \rightarrow z$, где z^* и z — комплексные переменные в случае бозонов и генераторы алгебры Грассмана в случае фермионов. Они антикоммутируют с φ и φ^* . Если гамильтониан H

квадратичен по операторам \bar{a} , a , то интеграл (5.198) гауссов. Он вычисляется при помощи формулы (3.119).

В качестве примера рассмотрим гамильтониан свободных частиц (5.17)

$$H_0 = \sum_k \xi_k a_k^\dagger a_k,$$

где ξ_k – энергия частицы, отсчитанная от химпотенциала. В этом случае производящий функционал (5.198) равен

$$Z_0[\varphi, \varphi^*] = \int_{z(\beta)=-\eta z(0)} D(z^*, z) \times \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \sum_k \left[z_k^* \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right) z_k + z_k^* \varphi_k + \varphi_k^* z_k \right] \right\}. \quad (5.201)$$

Этот интеграл можно представить в виде (3.119), если ввести комбинированный матричный индекс (k, τ) и записать

$$\begin{aligned} & \int_0^\beta d\tau \sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right) z_k(\tau) = \\ & = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{kk'} z_k^*(\tau) G_0^{-1}(k\tau, k'\tau') z_{k'}(\tau'), \end{aligned} \quad (5.202)$$

где

$$G_0^{-1}(k\tau, k'\tau') = \delta_{kk'} \delta(\tau - \tau') \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right).$$

Здесь $G_0(k\tau, k'\tau')$ – свободная одночастичная функция Грина в (k, τ) -представлении. Она отличается знаком от функции, введенной в р. 5.19 (см. уравнение (5.181)). Подставляя (5.202) в формулу (5.201), убеждаемся в том, что континуальный интеграл (5.201) в точности совпадает с (3.119), если отождествить матрицу G_0^{-1} с A , φ с ν , а φ^* с u^* . В результате получаем

$$Z_0[\varphi, \varphi^*] = Z_0[0, 0] \exp(\varphi^* G_0 \varphi). \quad (5.203)$$

Здесь

$$Z_0[0, 0] = (\det G_0^{-1})^n, \quad (5.204)$$

$$\varphi^* G_0 \varphi = \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{k_1 k_2} \varphi_{k_1}^*(\tau_1) G_0(k_1 \tau_1, k_2 \tau_2) \varphi_{k_2}(\tau_2).$$

(5.205)

Используя фурье-разложение гриновской функции (5.35), а также разложения

$$\varphi_k(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_s \varphi_k(\zeta_s) e^{-i\zeta_s \tau}, \quad \varphi_k^*(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_s \varphi_k^*(\zeta_s) e^{i\zeta_s \tau},$$

получаем

$$\varphi^* G_0 \varphi = \frac{1}{\beta} \sum_{ks} \varphi_k^*(\zeta_s) (\xi_k - i\zeta_s)^{-1} \varphi_k(\zeta_s),$$

где ζ_s – нечетные или четные мацубаровские частоты (5.32), (5.34) в зависимости от типа статистики.

При $\varphi = 0$, $\varphi^* = 0$ выражение (5.203) должно совпасть с большой статсуммой идеального газа, а

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_0$$

– с большим потенциалом. Чтобы убедиться в этом, вычислим

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_0 = -\frac{\eta}{\beta} \ln \det G_0^{-1} = -\frac{\eta}{\beta} \text{Sp} \ln G_0^{-1}. \quad (5.206)$$

Здесь использована формула

$$\ln \det A = \text{Sp} \ln A,$$

где A – матрица. Чтобы убедиться в ее справедливости, достаточно учесть, что определитель и след матрицы являются ее инвариантами. Это позволяет перейти к представлению, в котором матрица A диагональна. В этом представлении эта формула становится очевидной. Если учесть определение

(5.25) хронологического произведения при совпадающих временах, выражение (5.206) можно записать так:

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_0 = -\frac{\eta}{\beta} \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^{\beta} d\tau \sum_k \langle k\tau | \ln G_0^{-1} | k(\tau + \delta) \rangle.$$

Представим функцию $G_0^{-1}(\tau)$ в виде ряда Фурье (5.35). Тогда

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_0 = -\frac{\eta}{\beta} \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{ks} \ln(\xi_k - i\zeta_s) e^{i\zeta_s \delta}. \quad (5.207)$$

Здесь ζ_s – нечетные или четные мацубаровские частоты.

Для вычисления суммы по частотам, входящей в (5.207), рассмотрим контурный интеграл

$$\oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{z\delta}}{e^{\beta z} + \eta} \ln(\xi_k - z). \quad (5.208)$$

Контур C состоит из двух вертикальных прямых на рис. 5.26,

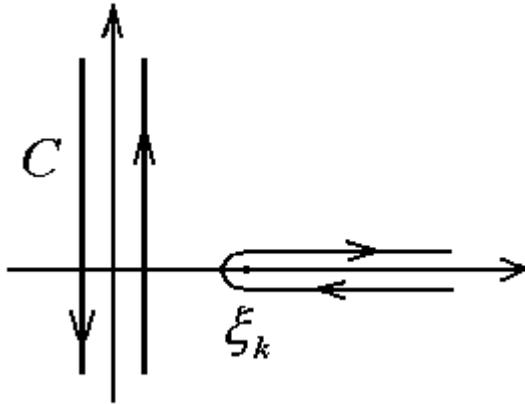


Рис. 5.26. Контур в интеграле (5.208)

охватывающих полюсы функции $(e^{\beta z} + \eta)^{-1}$ в точках $z_s = i\zeta_s$. Ветвь логарифма фиксирована так, чтобы на интервале $(0, \xi_k)$ она принимала значение $\ln(\xi_k - \varepsilon)$, где $\varepsilon = \text{Re } z$. Разрез соединяет точки ξ_k и ∞ . Вычет функции $(e^{\beta z} + \eta)^{-1}$ в полюсе z_s равен $-\eta/\beta$. Следовательно, по теореме Коши интеграл (5.208) равен

$$-\frac{\eta}{\beta} \sum_s e^{z_s \delta} \ln(\xi_k - z_s).$$

Это позволяет записать выражение (5.207) в виде

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_0 = \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_k \oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{z\delta}}{e^{\beta z} + \eta} \ln(\xi_k - z).$$

Подынтегральная функция дает возможность деформировать контур так, как показано на рис. 5.26. Выбранная ветвь логарифма на верхнем и нижнем берегах разреза принимает значения $\ln(\varepsilon - \xi_k) \mp i\pi$. Поскольку при переходе с верхнего берега на нижний логарифм приобретает слагаемое $-2\pi i$, сумма интегралов по берегам разреза равна

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_0 = -\sum_k \int_{\xi_k}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} + \eta}.$$

Входящий сюда интеграл вычисляется подстановкой $\exp(-\beta\varepsilon) = x$. В результате

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z_0 = -\frac{\eta}{\beta} \sum_k \ln(1 + \eta e^{-\beta\xi_k}).$$

Это выражение действительно совпадает с большим потенциалом идеального газа.

Термодинамические величины системы являются средними значениями обычного или хронологического

произведения операторов. Покажем, как они могут быть получены путем функционального дифференцирования по φ и φ^* производящего функционала (5.197).

С функциональными производными по обычным функциям мы имели дело в разделе 3. Введем функциональные производные по переменным Грассмана φ_k и φ_k^* . Как и в р. 3.5, определим левую $\delta^L / \delta\varphi$ и правую $\delta^R / \delta\varphi$ производные от некоторого функционала $\Phi[\varphi]$, являющегося элементом алгебры Грассмана. При дифференцировании следует использовать правило

$$\frac{\delta^L}{\delta\varphi_k} \varphi_l = \frac{\delta^R}{\delta\varphi_k} \varphi_l = \delta_{kl}. \quad (5.209)$$

Если среди величин k встречаются изменяющиеся непрерывно, соответствующие символы Кронекера в (5.209) необходимо заменить дельта-функциями. Все операции дифференцирования ставятся слева от функционала и действуют в порядке очередности – сначала ближайшая к нему, затем следующая и т. д. Действие левой производной $\delta^L / \delta\varphi_k$ на произвольный моном $\varphi_1\varphi_2\dots\varphi_n$ определяется следующим образом. Если моном не содержит множителя φ_k , результат дифференцирования равен нулю. Если же он содержит φ_k (один раз!), то этот множитель необходимо переместить в левое крайнее положение и удалить (см. (5.209)). Результат необходимо умножить на $(-1)^P$, где P – четность перестановки. Правая производная определяется аналогично, только теперь необходимо перемещать φ_k направо. Легко убедиться в том, что левые и правые производные

коммутируют между собой, а одноименные производные антикоммутируют. Левая производная монома, содержащего нечетное число генераторов φ , совпадает с правой и отличается от нее знаком, если это число четное.

5.23. Теория возмущений и функциональные методы

При наличии взаимодействия гамильтониан системы приобретает добавку V и становится равным $H_0 + V$. Тогда экспоненту в производящем функционале (5.198) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \exp\left[-S(z^*, z)\right] &= \exp\left[-\int_0^\beta d\tau V\left(\frac{\delta^R}{\delta\varphi}, \frac{\delta^L}{\delta\varphi^*}\right)\right] \times \\ &\times \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_k z_k^*(\tau) \frac{\partial}{\partial\tau} z_k(\tau) + H_0(z^*, z) + \right. \right. \\ &\left. \left. + \sum_k \varphi_k^*(\tau) z_k(\tau) + \sum_k z_k^*(\tau) \varphi_k(\tau)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (5.210)$$

Входящий сюда оператор $V\left(\frac{\delta^R}{\delta\varphi}, \frac{\delta^L}{\delta\varphi^*}\right)$ получается из $V(\bar{a}, a)$

заменой

$$\bar{a} \rightarrow z^* \rightarrow \frac{\delta^R}{\delta\varphi}, \quad a \rightarrow z \rightarrow \frac{\delta^L}{\delta\varphi^*}.$$

Чтобы убедиться в справедливости формулы (5.210), ограничимся взаимодействием системы фермионов с внешним полем. Гамильтониан взаимодействия равен

$$V(\tau) = \sum_{k_1 k_2} u_{k_1 k_2} \bar{a}_{k_1}(\tau) a_{k_2}(\tau), \quad (5.211)$$

где $u_{k_1 k_2}$ – матричный элемент энергии взаимодействия частицы с внешним полем. В этом случае оператор, входящий в (5.210), равен

$$V\left(\frac{\delta^R}{\delta\varphi}, \frac{\delta^L}{\delta\varphi^*}\right) = \sum_{k_1 k_2} u_{k_1 k_2} \frac{\delta^R}{\delta\varphi_{k_1}(\tau)} \frac{\delta^L}{\delta\varphi_{k_2}^*(\tau)}.$$

Интеграл от этой величины по τ можно представить в виде

$$\int_0^\beta d\tau V\left(\frac{\delta^R}{\delta\varphi}, \frac{\delta^L}{\delta\varphi^*}\right) = \sum_{12} U_{12} \frac{\delta^R}{\delta\varphi_1} \frac{\delta^L}{\delta\varphi_2^*},$$

где $1 = (k_1, \tau_1)$, $U_{12} = u_{k_1 k_2} \delta(\tau_1 - \tau_2)$, $\sum_1 = \sum_{k_1} \int_0^\beta d\tau_1$. В первом

порядке теории возмущений по взаимодействию V необходимо вычислить функциональную производную

$$\sum_{12} U_{12} \frac{\delta^R}{\delta\varphi_1} \frac{\delta^L}{\delta\varphi_2^*} \exp\left[-\sum_3 (\varphi_3^* z_3 + z_3^* \varphi_3)\right].$$

При помощи сформулированных выше правил дифференцирования находим для нее выражение

$$\sum_{12} U_{12} z_1^* z_2 \exp\left[-\sum_3 (\varphi_3^* z_3 + z_3^* \varphi_3)\right].$$

Используя следующие члены разложения первой экспоненты в правой части формулы (5.210), убеждаемся в справедливости этой формулы.

Выражение (5.210) позволяет переписать производящий функционал (5.198) в виде

$$Z[\varphi, \varphi^*] = \exp\left[-\int_0^\beta d\tau V\left(\frac{\delta^R}{\delta\varphi}, \frac{\delta^L}{\delta\varphi^*}\right)\right] Z_0[\varphi, \varphi^*], \quad (5.212)$$

где Z_0 – производящий функционал (5.203) системы в поле источников. Эта формула служит основой для построения ряда

теории возмущений по взаимодействию V . Она позволяет представить производящий функционал и связанные с ним величины, в частности функции Грина, в виде рядов по степеням взаимодействия.

Функция Грина свободных частиц в (k, τ) -представлении может быть получена путем двукратного дифференцирования производящего функционала (5.203):

$$-G_{12}^0 = \left\langle T_\tau \left(a_1^D \bar{a}_2^D \right) \right\rangle_0 = \left. \left\{ \frac{\delta^L}{\delta \varphi_1^*} \frac{\delta^L}{\delta \varphi_2} Z_0 \left[\varphi, \varphi^* \right] \right\} \right|_{\varphi = \varphi^* = 0}. \quad (5.213)$$

Индексом D отмечены операторы в представлении взаимодействия, $\langle \dots \rangle_0$ обозначает гиббсовское усреднение с гамильтонианом свободных частиц. Формулу (5.213) легко проверить путем дифференцирования экспоненты (5.203) с использованием упомянутых выше правил.

Применим формулу (5.213) к гриновской функции системы взаимодействующих частиц

$$-G_{12} = \left\langle T_\tau \left(a_1^H \bar{a}_2^H \right) \right\rangle, \quad (5.214)$$

где H – индекс гейзенберговского представления операторов, $\langle \dots \rangle$ – усреднение с гамильтонианом $H_0 + V$ в отсутствие

источников. Теперь $Z_0 \left[\varphi, \varphi^* \right]$ в формуле (5.213) необходимо заменить производящим функционалом (5.212). Разложение входящей в него экспоненты в ряд по взаимодействию V позволяет представить $Z \left[\varphi, \varphi^* \right]$ в виде $Z = Z_0 + Z_1 + \dots$

Получим поправку первого порядка Z_1 в случае гамильтониана взаимодействия (5.211). Выполняя двукратное дифференцирование экспоненты (5.203), находим

$$\begin{aligned}
 -Z_1[\varphi, \varphi^*] = Z_0[0, 0] & \left(\sum_{12} U_{12} G_{21}^0 + \sum_{1234} U_{12} G_{24}^0 G_{31}^0 \varphi_3^* \varphi_4 \right) \times \\
 & \times \exp \left(- \sum_{56} \varphi_5^* G_{56}^0 \varphi_6 \right).
 \end{aligned}$$

Подставляя это выражение вместо $Z_0[\varphi, \varphi^*]$ в формулу (5.213), получаем поправку первого порядка к функции Грина (5.214):

$$-G_{12}^0 \sum_{34} U_{34} G_{43}^0 - \sum_{34} G_{13}^0 U_{34} G_{42}^0. \quad (5.215)$$

Соответствующие этим слагаемым диаграммы изображены на рис. 5.27.

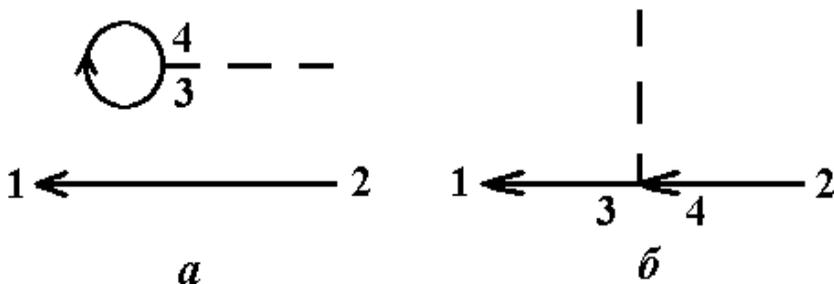


Рис. 5.27. Диаграммы первого порядка для функции Грина G_{12}

Диаграмма на рис.5.27(а) несвязная, а на рис. 5.27(б) – связная. В р. 5.12 было показано, что несвязные диаграммы в разложении функции Грина отсутствуют. Это следует из формулы (5.130) для функции Грина в представлении взаимодействия. Действительно, переходя в формуле (5.214) к этому представлению, получаем

$$-G_{12} = \frac{\langle T_\tau (a_1^D \bar{a}_2^D \sigma) \rangle_0}{\langle \sigma \rangle_0}, \quad (5.216)$$

где

$$\sigma = T_\tau \exp \left[- \int_0^\beta d\tau V_D(\tau) \right]$$

– температурный оператор рассеяния. Используя в формуле (5.216) теорему Вика, убеждаемся в том, что в первом порядке теории возмущений вклад числителя совпадает с (5.215), а вклад знаменателя равен

$$G_{12}^0 \sum_{34} U_{34} G_{43}^0.$$

Он компенсирует вклад несвязной диаграммы на рис.5.27(a). Поправка первого порядка к функции Грина (5.214) оказывается равной

$$G_{12}^1 = - \sum_{34} G_{13}^0 U_{34} G_{42}^0. \quad (5.217)$$

Чтобы автоматически исключить несвязные диаграммы, введем производящий функционал W для связных функций Грина:

$$W[\varphi, \varphi^*] = \ln Z[\varphi, \varphi^*]. \quad (5.218)$$

Одночастичная функция Грина (5.214) связана с этим функционалом соотношением

$$-G_{12} = \left\{ \frac{\delta^L}{\delta \varphi_1^*} \frac{\delta^L}{\delta \varphi_2} W[\varphi, \varphi^*] \right\}_{\varphi = \varphi^* = 0}. \quad (5.219)$$

Обобщение этой формулы на случай n -частичной функции Грина очевидно. Снова воспользуемся гамильтонианом (5.211)

и представим функционал (5.218) в виде ряда по взаимодействию $W = W_0 + W_1 + \dots$. Легко показать, что

$$-W_1[\varphi, \varphi^*] = \sum_{12} U_{12} G_{21}^0 + \sum_{1234} U_{12} G_{24}^0 G_{31}^0 \varphi_3^* \varphi_4.$$

Подставляя это выражение в формулу (5.219), находим поправку первого порядка (5.217) к функции Грина.

В общем случае любого взаимодействия $V(\bar{a}, a)$ n -частичная функция Грина (5.38), (5.42) может быть записана в виде

$$\begin{aligned} G^{(n)}(k_1 \tau_1, \dots, k_n \tau_n; k_{2n} \tau_{2n}, \dots, k_{n+1} \tau_{n+1}) = \\ = \frac{Z_0}{Z} \left\langle \exp \left[- \int_0^\beta d\tau V(z^*(\tau), z(\tau)) \right] \times \right. \\ \left. \times z_{k_1}(\tau_1) \dots z_{k_n}(\tau_n) z_{k_{n+1}}^*(\tau_{n+1}) \dots z_{k_{2n}}^*(\tau_{2n}) \right\rangle_0, \end{aligned} \quad (5.220)$$

где символом $\langle \dots \rangle_0$ обозначено функциональное среднее (П1.22). Представляя входящую сюда экспоненту в виде ряда, приходим к необходимости вычислять средние типа

$$\left\langle z_1 z_2 \dots z_n z_{n+1}^* z_{n+2}^* \dots z_{2n}^* \right\rangle_0.$$

При помощи теоремы Вика (П1.11) они выражаются через сумму произведений сверток (П1.23).

Статсумма (3.156) системы равна

$$\begin{aligned}
Z &= \int_{z_k(\beta)=-\eta z_k(0)} D(z^*, z) \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \times \right. \\
&\times \left[\sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right) z_k(\tau) + V(z^*(\tau), z(\tau)) \right] \left. \right\} = \quad (5.221) \\
&= Z_0 \left\langle \exp \left[-\int_0^\beta d\tau V(z^*(\tau), z(\tau)) \right] \right\rangle.
\end{aligned}$$

Представляя экспоненту в виде ряда, получаем отсюда

$$\begin{aligned}
\frac{Z}{Z_0} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \beta^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \times \\
&\times \left\langle V(z^*(\tau_1), z(\tau_1)) \dots V(z^*(\tau_n), z(\tau_n)) \right\rangle_0. \quad (5.222)
\end{aligned}$$

каждому члену этого ряда можно сопоставить диаграмму Фейнмана так, как это сделано в р. 5.12. Таким образом, мы имеем альтернативный метод вычисления функций Грина и связанных с ними термодинамических величин. Полученные этим методом величины совпадают с вычисленными в р. 5.12 методом, использующим операторный формализм.

5.24. Электрон-электронное взаимодействие и континуальные интегралы

Проиллюстрируем изложенную в предыдущем разделе теорию на примере межэлектронного взаимодействия в проводнике.

Из формулы (5.222) следует, что статистическая сумма электронной жидкости представляется в виде ряда $Z = Z_0 + Z_1 + \dots$ по гамильтониану электрон-электронного

взаимодействия. Вклад Z_0 в отсутствие взаимодействия вычислен в р. 5.22, а поправка первого порядка равна

$$\frac{Z_1}{Z_0} = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{iklm} \langle ik | \nu | lm \rangle \langle z_i^*(\tau) z_k^*(\tau) z_m(\tau) z_l(\tau) \rangle_0.$$

Здесь мы использовали гамильтониан (2.127) и правила $\bar{a} \rightarrow z^*$, $a \rightarrow z$. Спаривая сопряженные переменные Грассмана, получаем

$$\begin{aligned} \frac{Z_1}{Z_0} = & -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{iklm} \langle ik | \nu | lm \rangle \times \\ & \times \left\langle \left[z_i^{a*}(\tau) z_k^{b*}(\tau) z_m^b(\tau) z_l^a(\tau) + z_i^{a*}(\tau) z_k^{b*}(\tau) z_m^a(\tau) z_l^b(\tau) \right] \right\rangle_0. \end{aligned}$$

Используя (П1.23), находим отсюда

$$\begin{aligned} \frac{Z_1}{Z_0} = & -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{iklm} \langle ik | \nu | lm \rangle \left[G_{li}^0(0) G_{mk}^0(0) - G_{mi}^0(0) G_{lk}^0(0) \right] = \\ = & -\frac{\beta}{2} \sum_{ik} G_i^0(0) G_k^0(0) (\langle ik | \nu | ik \rangle - \langle ik | \nu | ki \rangle). \end{aligned} \quad (5.223)$$

Первое слагаемое в этой формуле обусловлено прямым электрон-электронным взаимодействием, а второе – обменным. Им соответствуют фейнмановские диаграммы на рис. 5.28.



Рис. 5.28. Диаграммы первого порядка для статсуммы (5.223)

Если учесть правило замены хронологического произведения при совпадающих аргументах τ нормальным, то поправка (5.223) примет вид

$$\frac{Z_1}{Z_0} = -\frac{\beta}{2} \sum_{ik} \bar{n}_i \bar{n}_k (\langle ik | \nu | ik \rangle - \langle ik | \nu | ki \rangle), \quad (5.224)$$

где \bar{n}_i – фермиевская функция распределения. Входящие в (5.224) двухэлектронные матричные элементы равны (2.130). Мы предоставляем читателю возможность самостоятельно получить вклад диаграмм на рис. 5.28 в свободную энергию полностью вырожденных и невырожденных электронов с кулоновским взаимодействием между ними (см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Статистическая физика, ч.1, 1995; С. Реймс, теория многоэлектронных систем, 1976; О.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, Вступ до статистичної фізики і термодинаміки, 2004).

Рассмотрим второй пример применения техники континуального интегрирования к электронной жидкости в проводниках. Методом, изложенным в предыдущем разделе, выведем дисперсионное уравнение для плазменных волн в наноструктурах при наличии магнитного поля (см. А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, Корреляционная энергия замагниченных электронов в наноструктурах и континуальные интегралы, Вісник ХНУ, серія “Фізика”, 2007). Речь идет о таких структурах как квантовые точки, нити, кольца, гетероструктуры с двумерным электронным газом. Повышенный интерес исследователей к этим системам обусловлен заманчивыми перспективами их использования в технике.

Здесь мы покажем, как метод континуального интегрирования используется в процессе расчета корреляционной энергии электронной жидкости в наноструктурах при наличии квантующего магнитного поля. Эта энергия равна разности энергии основного состояния

электронов и хартри-фоковской энергии, рассмотренной в р. 5.14. Попутно получим дисперсионное уравнение для магнитоплазменных волн в наноструктурах. Плазмоны в невырожденном электронном газе в отсутствие магнитного поля с использованием континуальных интегралов рассматривались в монографии В.Н.Попова «Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике» (1976). Автор этой работы воспользовался выделением в системе взаимодействующих электронов быстрых и медленных степеней свободы. Н.Нагаоса (N.Nagaosa, Quantum field theory in condensed matter physics, 1999) использовал более простой метод расчета корреляционной энергии электронов в трехмерной системе без магнитного поля. Здесь мы применяем этот метод к наноструктурам в магнитном поле. Потенциал конфайнмента, ограничивающий движение электронов в этих структурах, а также энергетический спектр электронов в них не конкретизируются.

Рассмотрим систему взаимодействующих электронов в наноструктуре на фоне положительного компенсирующего заряда ионов. Гамильтониан кулоновского взаимодействия электронов в представлении Мацубары может быть записан в виде

$$V(\tau) = \frac{1}{2L^d} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) [n(-\vec{q}, \tau)n(\vec{q}, \tau) - N], \quad (5.225)$$

где $n(\vec{q}, \tau)$ – пространственная фурье-компонента оператора плотности электронов, зависящая от волнового вектора \vec{q} и “мнимого” времени τ ; $v(\vec{q})$ – компонента Фурье (2.131) кулоновского потенциала; N – число электронов; L^d – нормировочный «объем» наноструктуры; d – число измерений пространства. Поскольку наносистема электронейтральна, в сумме по \vec{q} в формуле (5.225) и ниже необходимо опустить слагаемое с $\vec{q} = 0$. Оператор n , входящий в формулу (5.225), равен

$$n(\vec{q}, \tau) = \sum_{\kappa\kappa'\sigma} I_{\kappa'\kappa}(-\vec{q}) \bar{a}_{\kappa'\sigma}(\tau) a_{\kappa\sigma}(\tau). \quad (5.226)$$

Здесь κ – набор орбитальных квантовых чисел электрона в магнитном поле и в поле потенциала конфинмента, σ – спиновое квантовое число, $I_{\kappa'\kappa}$ – матричные элементы плоской волны (2.137) в базисе $\{|\kappa\rangle\}$. Функция $\nu(\vec{q})$ зависит от размерности системы. В трехмерной системе она равна

$$\nu(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2},$$

где e – заряд электрона, в двумерном электронном газе

$$\nu(q) = \frac{2\pi e^2}{q},$$

а в тонкой нити радиуса a

$$\nu(q) = -2e^2 \ln(qa).$$

Статистическая сумма электронной жидкости в наносистеме равна (см. (3.156))

$$Z = \int D\psi^* D\psi \exp\left\{-S[\psi^*, \psi]\right\}, \quad (5.227)$$

где ψ и ψ^* – переменные Грассмана, S – мацубаровское действие (3.157). Используя разложение ψ и ψ^* по базису $\{|\kappa\sigma\rangle\}$, представим формулу (5.227) в виде

$$Z = \exp\left[\frac{\beta N}{2L^d} \sum_{\vec{q}} \nu(\vec{q})\right] \int Dz^* Dz \times \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\kappa\sigma} z_{\kappa\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_{\kappa\sigma} \right) z_{\kappa\sigma}(\tau) + V(z^*(\tau), z(\tau)) \right]\right\}. \quad (5.228)$$

Отметим, что поскольку нас интересует отношение Z/Z_0 (Z_0 – статсумма электронного газа в отсутствие кулоновского взаимодействия), то нет необходимости уточнять меру континуального интегрирования в (5.228) и следить за не существенными здесь нормировочными множителями.

Слагаемое (5.225) в показателе экспоненты (5.228) содержит произведение четырех переменных Грассмана. При помощи тождества Хаббарда-Стратоновича (3.119) эта экспонента может быть преобразована к виду

$$\begin{aligned} & \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2L^d} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) n(-\vec{q}, \tau) n(\vec{q}, \tau) \right] \sim \\ & \sim \int D\varphi^*(\vec{q}, \tau) D\varphi(\vec{q}, \tau) \times \\ & \times \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \sum_{\vec{q}} \left[\varphi^*(\vec{q}, \tau) \frac{e^2}{2v(\vec{q})} \varphi(\vec{q}, \tau) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{ie}{2L^{d/2}} n(-\vec{q}, \tau) \varphi(\vec{q}, \tau) + \varphi^*(\vec{q}, \tau) \frac{ie}{2L^{d/2}} n(\vec{q}, \tau) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.229)$$

где $\varphi(\vec{r}, \tau)$ – вспомогательное вещественное поле. После подстановки экспоненты (5.229) в формулу (5.228) и перехода к (κ, σ, s) -представлению (ζ_s – нечетные мацубаровские частоты) приходим к гауссовому континуальному интегралу на алгебре Грассмана (3.114), (3.117), который вычисляется точно. Входящая в него матрица A имеет вид

$$M_{\kappa_1\sigma_1s_1,\kappa_2\sigma_2s_2} = -G^{-1}(\kappa_1, \sigma_1, \zeta_{s_1})\delta_{\kappa_1\kappa_2}\delta_{\sigma_1\sigma_2}\delta_{s_1s_2} + \\ + \frac{ie}{(\beta L^d)^{1/2}} \sum_{\vec{q}} I_{\kappa_1\kappa_2}(\vec{q}) \varphi\left(\vec{q}, \frac{\zeta_{s_1} - \zeta_{s_2}}{\hbar}\right) \delta_{\sigma_1\sigma_2},$$

(5.230)

где $G(\kappa, \sigma, \zeta_s) = (i\zeta_s - \xi_{\kappa\sigma})^{-1}$ – температурная функция Грина электронов в потенциале конфинмента и в магнитном поле, $\varphi\left(\vec{q}, \frac{\zeta_s}{\hbar}\right)$ – временная компонента Фурье функции $\varphi(\vec{q}, \tau)$.

Учтем соотношение

$$\det M = \exp(\ln \det M) = \exp(\text{Sp} \ln M).$$

Тогда статсумма становится равной

$$Z = \exp\left[\frac{\beta N}{2L^d} \sum_{\vec{q}} \nu(\vec{q}) + \text{Sp} \ln(-G^{-1})\right] \times \\ \times \int D\varphi^*(\vec{q}, \omega_l) D\varphi(\vec{q}, \omega_l) \times \quad (5.231) \\ \times \exp\left\{-\sum_{\vec{q}l} \varphi^*(\vec{q}, \omega_l) \frac{e^2}{2\nu(\vec{q})} \varphi(\vec{q}, \omega_l) + \text{Sp} \ln(1 - GA_1)\right\},$$

где A_1 – второе слагаемое в правой части формулы (5.230), ω_l – четные мацубаровские частоты.

Слагаемое $\text{Sp} \ln(1 - GA_1)$ в показателе экспоненты (5.231) обусловлено кулоновским взаимодействием электронов. Выполним разложение этого слагаемого по степеням константы связи e . Линейный член разложения исчезает в силу электронейтральности наносистемы, а квадратичный член дает

$$\begin{aligned} \frac{Z}{Z_0} &= \int D\varphi^* D\varphi \times \\ &\times \exp \left\{ - \sum_{\bar{q}l} \varphi^*(\bar{q}, \omega_l) \left[\frac{e^2}{2\nu(\bar{q})} - \frac{e^2}{2} P(\bar{q}, \omega_l) \right] \varphi(\bar{q}, \omega_l) \right\} \times \quad (5.232) \\ &\times \left[\int D\varphi^* D\varphi \exp \left\{ - \sum_{\bar{q}l} \varphi^*(\bar{q}, \omega_l) \frac{e^2}{2\nu(\bar{q})} \varphi(\bar{q}, \omega_l) \right\} \right]^{-1}, \end{aligned}$$

где

$$P(\bar{q}, \omega_l) = \frac{1}{\beta L^d} \sum_{\kappa\kappa'\sigma_s} G(\kappa, \sigma, \zeta_s) G(\kappa', \sigma, \zeta_s + \hbar\omega_l) |I_{\kappa'\kappa}(\bar{q})|^2 \quad (5.233)$$

– температурный поляризационный оператор в магнитном поле. Используемая здесь аппроксимация эквивалентна приближению хаотических фаз в теории многоэлектронных систем (см. р. 5.16).

Входящие в формулу (5.232) континуальные интегралы гауссовы. Вычисляя их, получаем свободную энергию

$$F = -\beta^{-1} \ln Z$$

электронной жидкости в наноструктуре:

$$F = F_0 - \frac{N}{2L^d} \sum_{\bar{q}} \nu(\bar{q}) + \frac{1}{2\beta} \sum_{\bar{q}l} \ln [1 - \nu(\bar{q}) P(\bar{q}, \omega_l)], \quad (5.234)$$

где F_0 – свободная энергия в отсутствие кулоновского взаимодействия. При нулевой температуре сумма \sum_l в формуле (5.234) может быть заменена интегралом. Тогда эта формула превращается в энергию основного состояния

электронов:

$$E = E_0 - \frac{N}{2L^d} \sum_{\vec{q}} \nu(\vec{q}) + \frac{\hbar}{4\pi} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ln[1 - \nu(\vec{q})P(\vec{q}, ix)]. \quad (5.235)$$

Здесь E_0 – энергия основного состояния в отсутствие кулоновского взаимодействия. Последнее слагаемое в (5.235) представляет собой корреляционную энергию электронов в наноструктуре в приближении хаотических фаз.

Сумма \sum_l в (5.234) может быть выражена через контурный интеграл так, как это сделано в р. 5.16. Деформируя контур интегрирования, получим вклад одночастичных возбуждений в свободную энергию и коллективных возбуждений – магнитоплазмонов. Их спектр и затухание являются корнями уравнения (5.166).

Приложение 1

В этом Приложении мы докажем теорему Вика при конечной температуре, использованную в рр. 5.8, 5.12. При доказательстве будет использован операторный формализм и формализм континуального интегрирования (см. А.А. Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, 1962; J.W. Negele and H. Orland, Quantum Many-Particle Systems, 1988).

В р. 5.12 показано, что для вычисления функций Грина равновесной системы необходимо знать среднее значение хронологического произведения полевых операторов в представлении взаимодействия:

$$\left\langle T_{\tau} \left[\psi_{\alpha_1}(\vec{r}_1, \tau_1) \dots \bar{\psi}_{\alpha'_1}(\vec{r}'_1, \tau'_1) \dots \right] \right\rangle, \quad (\text{П1.1})$$

где $\langle \dots \rangle$ – усреднение по большому каноническому ансамблю Гиббса системы свободных частиц. Подставляя в (П1.1) фурье-разложения полевых операторов (5.20), получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}_1} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}_2} \dots \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}'_1} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}'_2} \dots \times \\ & \times \left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_1}(\tau_1) a_{\vec{p}_2}(\tau_2) \dots \bar{a}_{\vec{p}'_1}(\tau'_1) \bar{a}_{\vec{p}'_2}(\tau'_2) \dots \right] \right\rangle \times \quad (\text{П1.2}) \\ & \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2 + \dots - \vec{p}'_1 \vec{r}'_1 - \vec{p}'_2 \vec{r}'_2 - \dots \right) \right], \end{aligned}$$

где спиновые индексы опущены.

В сумме по $\vec{p}_1, \dots, \vec{p}'_1, \dots$ отличны от нуля лишь те слагаемые, в которых содержится равное число операторов рождения и уничтожения с одним и тем же импульсом. В частности, отличны от нуля слагаемые, содержащие только по одному оператору рождения и уничтожения с одинаковым импульсом

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}_1} \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}_2} \dots \times \\ & \times \left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_1}(\tau_1) a_{\vec{p}_2}(\tau_2) \dots \bar{a}_{\vec{p}_1}(\tau'_1) \bar{a}_{\vec{p}_2}(\tau'_2) \dots \right] \right\rangle \times \quad (\text{П1.3}) \\ & \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2 + \dots - \vec{p}_1 \vec{r}'_1 - \vec{p}_2 \vec{r}'_2 - \dots \right) \right], \end{aligned}$$

Отличны от нуля также члены, получающиеся из (П1.3) перестановкой импульсов $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots$ у операторов рождения или у операторов уничтожения:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}_1} \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}_2} \dots \times \\ & \times \left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_1}(\tau_1) a_{\vec{p}_2}(\tau_2) \dots \bar{a}_{\vec{p}_2}(\tau'_1) \bar{a}_{\vec{p}_1}(\tau'_2) \dots \right] \right\rangle \times \quad (\text{П1.4}) \\ & \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2 + \dots - \vec{p}'_1 \vec{r}'_1 - \vec{p}'_2 \vec{r}'_2 - \dots \right) \right], \end{aligned}$$

Выпишем также члены суммы (П1.1), у которых несколько операторов рождения и уничтожения имеют одинаковый импульс. Например, если таких операторов два, имеем

$$\frac{1}{V} \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}_1} \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}_2} \dots \times$$

$$\times \left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_1}(\tau_1) a_{\vec{p}_1}(\tau_2) a_{\vec{p}_2}(\tau_3) \dots \bar{a}_{\vec{p}_1}(\tau'_1) \bar{a}_{\vec{p}_1}(\tau'_2) \bar{a}_{\vec{p}_2}(\tau'_3) \dots \right] \right\rangle \times (\text{П1.5})$$

$$\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2 + \dots - \vec{p}'_1 \vec{r}'_1 - \vec{p}'_2 \vec{r}'_2 - \dots) \right].$$

Число множителей V^{-1} в суммах (П1.2)-(П1.5) равно числу операторов уничтожения.

Выражения (П1.3) и (П1.4) отличаются от (П1.5) тем, что в них число множителей V^{-1} равно числу суммирований, а в членах типа (П1.5) таких множителей больше. Это означает, что в термодинамическом пределе $V \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty, N/V = \text{const}$, где N – число частиц в системе, в сумме (П1.2) остаются лишь слагаемые типа (П1.3), (П1.4). Поскольку в этих слагаемых $\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2 \neq \dots$, можно усреднять каждую пару операторов с одинаковым импульсом в

$$\left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_1}(\tau_1) a_{\vec{p}_2}(\tau_2) \dots \bar{a}_{\vec{p}_1}(\tau'_1) \bar{a}_{\vec{p}_2}(\tau'_2) \dots \right] \right\rangle$$

независимо. Поскольку в случае фермионов операторы под знаком хронологического произведения антикоммутируют, т. е. ведут себя как переменные Грассмана, то для четырех операторов слагаемые типа (П1.3), (П1.4) содержат

$$\mp \left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_1}(\tau_1) \bar{a}_{\vec{p}_1}(\tau'_1) \right] \right\rangle \left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_2}(\tau_2) \bar{a}_{\vec{p}_2}(\tau'_2) \right] \right\rangle,$$

$$\left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_1}(\tau_1) \bar{a}_{\vec{p}_1}(\tau'_2) \right] \right\rangle \left\langle T_\tau \left[a_{\vec{p}_2}(\tau_2) \bar{a}_{\vec{p}_2}(\tau'_1) \right] \right\rangle.$$

Здесь верхний знак относится к фермионам, а нижний – к бозонам. В случае бозонов операторы под знаком

хронологического произведения коммутируют. Это означает, что в термодинамическом пределе

$$\begin{aligned}
 & \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_1}(\tau_1) a_{\bar{p}_2}(\tau_2) \bar{a}_{\bar{p}'_1}(\tau'_1) \bar{a}_{\bar{p}'_2}(\tau'_2) \right] \right\rangle = \\
 & = \mp \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_1}(\tau_1) \bar{a}_{\bar{p}'_1}(\tau'_1) \right] \right\rangle \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_2}(\tau_2) \bar{a}_{\bar{p}'_2}(\tau'_2) \right] \right\rangle + \\
 & + \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_1}(\tau_1) \bar{a}_{\bar{p}'_2}(\tau'_2) \right] \right\rangle \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_2}(\tau_2) \bar{a}_{\bar{p}'_1}(\tau'_1) \right] \right\rangle = \quad (\text{П1.6}) \\
 & = \mp G_0(\bar{p}_1 \tau_1, \bar{p}'_1 \tau'_1) G_0(\bar{p}_2 \tau_2, \bar{p}'_2 \tau'_2) + \\
 & + G_0(\bar{p}_1 \tau_1, \bar{p}'_2 \tau'_2) G_0(\bar{p}_2 \tau_2, \bar{p}'_1 \tau'_1),
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 G_0(\bar{p}_1 \tau_1, \bar{p}_2 \tau_2) &= - \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_1}(\tau_1) \bar{a}_{\bar{p}_2}(\tau_2) \right] \right\rangle = \\
 &= -\delta_{\bar{p}_1 \bar{p}_2} \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_1}(\tau_1) \bar{a}_{\bar{p}_1}(\tau_2) \right] \right\rangle \quad (\text{П1.7})
 \end{aligned}$$

– свободная функция Грина (5.96).

Среднее значение от хронологического произведения большего числа операторов в слагаемых (П1.3), (П1.4) равно сумме всевозможных произведений попарных средних. Это утверждение составляет содержание теоремы Вика. Для вычисления средних, входящих в (П1.2), необходимо всеми возможными способами спаривать операторы уничтожения с операторами рождения. Возникающее при этом среднее пары операторов

$$\begin{aligned}
 & \left\langle T_\tau \left[a_{\bar{p}_1}(\tau_1) \bar{a}_{\bar{p}_2}(\tau_2) \right] \right\rangle = a_{\bar{p}_1}^b(\tau_1) \bar{a}_{\bar{p}_2}^b(\tau_2) = \\
 & = -\bar{a}_{\bar{p}_2}^b(\tau_2) a_{\bar{p}_1}^b(\tau_1) = -G_0(\bar{p}_1 \tau_1, \bar{p}_2 \tau_2) \quad (\text{П1.8})
 \end{aligned}$$

называется сверткой. Операторы в свертке необходимо поставить рядом, следя за четностью перестановки в случае фермионов. Способы спаривания суммируются.

Теорема Вика справедлива и для среднего от хронологического произведения полевых операторов в

представлении взаимодействия. Только свертка в этом случае определяется соотношением

$$\langle T_\tau [\psi_1 \bar{\psi}_2] \rangle = \psi_1^a \bar{\psi}_2^a = -\bar{\psi}_2^a \psi_1^a = -G_0(1,2), \quad (\text{П1.9})$$

где $1 = (\alpha_1, \vec{r}_1, \tau_1), \dots$ (см. р. 5.12).

Для вывода теоремы Вика в технике континуального интегрирования вычислим отношение континуальных интегралов

$$\frac{\int D(z^*, z) z_{i_1} z_{i_2} \dots z_{i_n} z_{j_n}^* \dots z_{j_2}^* z_{j_1}^* \exp\left(-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j\right)}{\int D(z^*, z) \exp\left(-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j\right)}, \quad (\text{П1.10})$$

где z и z^* – комплексные числа в случае бозонов и переменные Грассмана в случае фермионов, A – c -числовая несингулярная матрица размерности $n \times n$ (в случае бозонов она должна обеспечивать сходимость интегралов). С интегралами, входящими в (П1.10), мы уже встречались в рр.3.5, 5.5. Из (5.41) и (5.42) следует, что $i = (k, \tau)$,

$$\sum_i = \int_0^\beta d\tau \sum_k .$$

Прямое вычисление интегралов (П1.10) с использованием правил (3.105) при $n = 1, 2$ дает в случае фермионов

$$\frac{\int dz^* dz z z^* \exp(-z^* A z)}{\int dz^* dz \exp(-z^* A z)} = \frac{1}{A}$$

(A – комплексное число),

$$\frac{\int dz_1^* dz_1 dz_2^* dz_2 z_1 z_2 z_1^* z_2^* \exp\left(-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j\right)}{\int dz_1^* dz_1 dz_2^* dz_2 \exp\left(-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j\right)} = A_{22}^{-1} A_{11}^{-1} - A_{12}^{-1} A_{21}^{-1},$$

где A^{-1} – матрица 2×2 , обратная матрице A . При любом n имеем

$$\begin{aligned} \frac{\int D(z^*, z) z_{i_1} \dots z_{i_n} z_{j_n}^* \dots z_{j_1}^* \exp\left(-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j\right)}{\int D(z^*, z) \exp\left(-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j\right)} &= \\ &= \sum_P (-\eta)^P A_{i_{Pn}, j_n}^{-1} \dots A_{i_{P1}, j_1}^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{П1.11})$$

где \sum_P – сумма по всем перестановкам первых индексов i_n, \dots, i_1 матриц A^{-1} , $\eta = +1$ для фермионов и $\eta = -1$ для бозонов.

Равенство (П1.11) можно доказать иначе. Для этого введем производящий функционал

$$C[\varphi, \varphi^*] = \frac{\int D(z^*, z) \exp\left[-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j + \sum_i (z_i^* \varphi_i + \varphi_i^* z_i)\right]}{\int D(z^*, z) \exp\left[-\sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j\right]}. \quad (\text{П1.12})$$

Здесь φ и φ^* – комплексные числа в случае бозонов и грассманы переменные в случае фермионов. В последнем случае они антикоммутируют между собой и с переменными Грассмана z, z^* . Используя тождество (3.119), получаем

$$C[\varphi, \varphi^*] = \exp \left[\sum_{ij} \varphi_i^* A_{ij}^{-1} \varphi_j \right]. \quad (\text{П1.13})$$

Вычисляя левые функциональные производные производящего функционала (П1.12) по φ^*, φ и полагая затем $\varphi^* = \varphi = 0$, находим

$$\begin{aligned} & \frac{\delta^{2n} C[\varphi, \varphi^*]}{\delta \varphi_{i_1}^* \dots \delta \varphi_{i_n}^* \delta \varphi_{j_n} \dots \delta \varphi_{j_1}} \Big|_{\substack{\varphi^*=0 \\ \varphi=0}} = \\ & = (-\eta)^n \frac{\int D(z^*, z) \exp \left(- \sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j \right) z_{i_1} \dots z_{i_n} z_{j_n}^* \dots z_{j_1}^*}{\int D(z^*, z) \exp \left(- \sum_{ij} z_i^* A_{ij} z_j \right)}. \end{aligned} \quad (\text{П1.14})$$

Здесь мы учли $z_i^* \varphi_i = -\varphi_i z_i^*$, а также

$$\frac{\partial \varphi_j}{\delta \varphi_i} = \delta_{ji}, \quad \frac{\partial \varphi_j^*}{\delta \varphi_i^*} = \delta_{ji}.$$

С другой стороны, производная функционала (П1.13) равна

$$\begin{aligned} & \frac{\delta^{2n} C[\varphi, \varphi^*]}{\delta \varphi_{i_1}^* \dots \delta \varphi_{i_n}^* \delta \varphi_{j_n} \dots \delta \varphi_{j_1}} \Big|_{\varphi=0}^{\varphi^*=0} = \\ & = (-\eta)^n \sum_P (-1)^P A_{i_{Pn}, j_n}^{-1} \dots A_{i_{P1}, j_1}^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{П1.15})$$

Сравнивая (П1.14) и (П1.15), убеждаемся в справедливости формулы (П1.11).

Учтем теперь представление свободных функций Грина (5.41) и (5.42) в виде континуальных интегралов:

$$\begin{aligned} G_0(k_1 \tau_1, k_2 \tau_2) &= -\frac{1}{\Xi_0} \int D(z^*, z) \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left[\sum_k z_k^*(\tau) \times \right. \right. \\ & \times \left. \left. \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) z_k(\tau) + H_0(z^*(\tau), z(\tau)) \right] \right\} z_{k_1}(\tau_1) z_{k_2}^*(\tau_2), \end{aligned} \quad (\text{П1.16})$$

$$\begin{aligned} K_0(k_1 \tau_1, k_2 \tau_2; k_4 \tau_4, k_3 \tau_3) &= \frac{1}{\Xi_0} \int D(z^*, z) \times \\ & \times \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left[\sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) z_k(\tau) + H_0(z^*(\tau), z(\tau)) \right] \right\} \times (\text{П1.17}) \\ & \times z_{k_1}(\tau_1) z_{k_2}(\tau_2) z_{k_3}^*(\tau_3) z_{k_4}^*(\tau_4), \end{aligned}$$

где $\Xi_0 = \text{Spexp}(-\beta H'_0)$ – статсумма свободных частиц с гамильтонианом H_0 . Входящие в (П1.16) и (П1.17) интегралы вычисляются при помощи формулы (П1.11). Чтобы ее использовать, запишем показатель экспоненты в (П1.16) и (П1.17) в виде

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\beta d\tau \sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right) z_k(\tau) = \\
 & = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{kk'} z_k^*(\tau) \delta_{kk'} \delta(\tau - \tau') \left(\frac{\partial}{\partial \tau'} + \xi_{k'} \right) z_{k'}(\tau') = \quad (\text{П1.18}) \\
 & = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{kk'} z_k^*(\tau) A(k\tau, k'\tau') z_{k'}(\tau').
 \end{aligned}$$

Здесь $\xi_k = \varepsilon_k - \mu$ – энергия частицы в состоянии k , отсчитанная от химпотенциала μ . Тогда из формулы (П1.11) получаем

$$\begin{aligned}
 & -A^{-1}(k_1\tau_1, k_2\tau_2) = G_0(k_1\tau_1, k_2\tau_2) = \\
 & = -\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right)_{k_1\tau_1, k_2\tau_2}^{-1} = \delta_{k_1k_2} G_{k_1}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2), \quad (\text{П1.19})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & K_0(k_1\tau_1, k_2\tau_2; k_4\tau_4, k_3\tau_3) = \\
 & = G_0(k_1\tau_1, k_4\tau_4) G_0(k_2\tau_2, k_3\tau_3) \mp \\
 & \mp G_0(k_1\tau_1, k_3\tau_3) G_0(k_2\tau_2, k_4\tau_4). \quad (\text{П1.20})
 \end{aligned}$$

Мы получили одночастичную (П1.19) и двухчастичную (П1.20) функции Грина свободных частиц (см. (5.95) и (5.96)). Обобщение этого результата на случай n -частичной функции Грина очевидно. Таким образом, формула (П1.11) представляет

собой теорему Вика в технике континуального интегрирования. Отметим, что фурье-преобразование функции (П1.19) по $\tau_1 - \tau_2$ дает выражение

$$G_0(k, \zeta_s) = (i\zeta_s - \xi_k)^{-1},$$

совпадающее с (5.89).

Осталось выяснить, как выражается свертка пары операторов (П1.8) через континуальные интегралы. Из формулы (П1.16) следует

$$G_0(k_1\tau_1, k_2\tau_2) = -\left\langle z_{k_1}(\tau_1) z_{k_2}^*(\tau_2) \right\rangle_0, \quad (\text{П1.21})$$

где

$$\begin{aligned} \left\langle F(z, z^*) \right\rangle_0 &= \frac{1}{\Xi_0} \int D(z^*, z) \times \\ &\times \exp \left[-\int_0^\beta d\tau \sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right) z_k(\tau) \right] F(z, z^*) \end{aligned} \quad (\text{П1.22})$$

– функциональное среднее величины $F(z, z^*)$. С другой стороны,

$$-G_0(k_1\tau_1, k_2\tau_2) = a_{k_1}^b(\tau_1) \bar{a}_{k_2}^b(\tau_2).$$

Следовательно, свертка свободных операторов уничтожения и рождения частиц изображается функциональным средним

$$\begin{aligned} a_{k_1}^b(\tau_1) \bar{a}_{k_2}^b(\tau_2) &= z_{k_1}^b(\tau_1) z_{k_2}^{*b}(\tau_2) = \\ &= \frac{1}{\Xi_0} \int D(z^*, z) \exp \left[-\int_0^\beta d\tau \sum_k z_k^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right) z_k(\tau) \right] \times \\ &\times z_{k_1}(\tau_1) z_{k_2}^*(\tau_2) = -G_0(k_1\tau_1, k_2\tau_2). \end{aligned} \quad (\text{П1.23})$$

Здесь и в (П1.22) интегрирование выполняется с учетом граничного условия $|z(\beta)\rangle = -\eta|z(0)\rangle$.

Приложение 2

В этом Приложении мы вычислим поляризационный оператор (5.165) вырожденного электронного газа с законом дисперсии $\varepsilon = p^2/2m$ в приближении хаотических фаз (см. A.L. Fetter, J.D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, 1971).

Вещественная часть запаздывающего поляризационного оператора может быть представлена в виде

$$\text{Re}\Pi^+(\vec{q}, \omega) = 2\text{P}\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \Theta(p_F - p) \times \left(\frac{1}{\hbar\omega - \frac{\vec{p}\hbar\vec{q}}{m} - \frac{\hbar^2q^2}{2m}} - \frac{1}{\hbar\omega + \frac{\vec{p}\hbar\vec{q}}{m} + \frac{\hbar^2q^2}{2m}} \right), \quad (\text{П2.1})$$

где P – символ главного значения интеграла. Этот интеграл легко вычисляется в сферических координатах (p, θ, φ) в импульсном пространстве с осью p_z вдоль вектора \vec{q} . Выполняя в интеграле (П2.1) интегрирование по переменной $x = \cos\theta$, получаем

$$\int_{-1}^1 dx \left(\frac{1}{\hbar\omega_- - \frac{p\hbar qx}{m}} - \frac{1}{\hbar\omega_+ + \frac{p\hbar qx}{m}} \right) = -\frac{m}{p\hbar q} \ln \left| \frac{(pq - m\omega_-)(pq + m\omega_+)}{(pq + m\omega_-)(pq - m\omega_+)} \right|,$$

где

$$\omega_{\pm} = \omega \pm \frac{\hbar q^2}{2m} = \omega \pm \omega_q.$$

Следовательно, выражение (П2.1) равно

$$\operatorname{Re} \Pi^+(q, \omega) = -\frac{m}{2\pi^2 \hbar^4 q} \mathcal{P} \int_0^{p_F} dp p \ln \left| \frac{(pq + m\omega_+)(pq - m\omega_-)}{(pq - m\omega_+)(pq + m\omega_-)} \right|.$$

Входящие сюда интегралы

$$\mathcal{P} \int_0^{p_F} dp p \ln \left| \frac{p + p_0}{p - p_0} \right|$$

в результате замены переменной интегрирования $p = p' \pm p_0$ превращаются в интеграл

$$\int_{p_0 - p_F}^{p_0 + p_F} dp' (p' - p_0) \ln |p'|,$$

который элементарно вычисляется интегрированием по частям:

$$\mathcal{P} \int_0^{p_F} dp p \ln \left| \frac{p + p_0}{p - p_0} \right| = p_0 p_F + \frac{p_F^2 - p_0^2}{2} \ln \left| \frac{p_0 + p_F}{p_0 - p_F} \right|$$

(см. С. Реймс, Теория многоэлектронных систем, 1976). Это дает

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Pi^+(q, \omega) = & -\frac{mk_F}{2\pi^2 \hbar^2} \left\{ 1 + \right. \\ & + \frac{k_F}{2q} \left[1 - \left(\frac{\omega_+}{qv_F} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{qv_F + \omega_+}{qv_F - \omega_+} \right| - \\ & \left. - \frac{k_F}{2q} \left[1 - \left(\frac{\omega_-}{qv_F} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{qv_F + \omega_-}{qv_F - \omega_-} \right| \right\}. \end{aligned} \quad (\text{П2.2})$$

Сдвигая переменную интегрирования в поляризованном операторе и учитывая $\varepsilon_{-\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}}$, убеждаемся в том, что он может быть записан в виде

$$\begin{aligned} \Pi^+(\vec{q}, \omega) = & 2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\varepsilon_{\vec{p}}) \left[1 - f(\varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}}) \right] \times \\ & \times \left(\frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}} + \varepsilon_{\vec{p}} + i0} - \frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}} + i0} \right). \end{aligned} \quad (\text{П2.3})$$

Мнимая часть этого интеграла равна

$$\begin{aligned} \text{Im}\Pi^+(\vec{q}, \omega) = & -\frac{1}{4\pi^2\hbar^4} \int d^3 p f(\varepsilon_{\vec{p}}) \left[1 - f(\varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}}) \right] \times \\ & \times \left[\delta(\omega - \omega_{\vec{q}\vec{p}}) - \delta(\omega + \omega_{\vec{q}\vec{p}}) \right], \end{aligned} \quad (\text{П2.4})$$

где

$$\hbar\omega_{\vec{q}\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}+\hbar\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}}.$$

Ограничимся случаем $\omega \geq 0$. Тогда произведение функций Хевисайда в (П2.4) гарантирует положительность $\omega_{\vec{q}\vec{p}}$.

Следовательно, слагаемое с $\delta(\omega + \omega_{\vec{q}\vec{p}})$ исчезает:

$$\begin{aligned} \text{Im}\Pi^+(\vec{q}, \omega) = & -\frac{1}{4\pi^2\hbar} \int d^3 k \Theta(k_F - k) \times \\ & \times \Theta\left(\left|\vec{k} + \vec{q}\right| - k_F\right) \delta\left(\omega - \frac{\hbar\vec{k}\vec{q}}{m} - \frac{\hbar q^2}{2m}\right). \end{aligned} \quad (\text{П2.5})$$

Здесь мы перешли к интегрированию по волновому вектору. В этом выражении вектор \vec{k} находится внутри сферы Ферми, а $\vec{k} + \vec{q}$ – за ее пределами. Дельта-функция требует, чтобы выполнялось равенство

$$\omega = \frac{\hbar\vec{k}\vec{q}}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m}. \quad (\text{П2.6})$$

Это уравнение плоскости в пространстве волновых векторов, перпендикулярной вектору \vec{q} .

Рассмотрим сначала случай $q > 2k_F$, когда сфера Ферми, внутри которой лежит вектор \vec{k} в интеграле (П2.5), и ее сдвинутый на \vec{q} аналог не пересекаются. Мнимая часть (П2.5) пропорциональна площади сечения сферы Ферми радиуса k_F плоскостью (П2.6). Вычислим ее в трех различных случаях:

- 1) $q > 2k_F, -qv_F + \frac{\hbar q^2}{2m} \leq \omega \leq qv_F + \frac{\hbar q^2}{2m}$;
- 2) $q < 2k_F, qv_F - \frac{\hbar q^2}{2m} \leq \omega \leq qv_F + \frac{\hbar q^2}{2m}$;
- 3) $q < 2k_F, 0 \leq \omega \leq qv_F - \frac{\hbar q^2}{2m}$.

В последних двух случаях сфера Ферми и ее сдвинутый аналог пересекаются.

В первом случае необходимо найти упомянутую площадь сечения сферы Ферми плоскостью (П2.6). Эта площадь равна нулю, когда секущая плоскость касается сферы Ферми в точках, лежащих на противоположных концах ее диаметра, т. е. при

$$\omega = \pm qv_F + \frac{\hbar q^2}{2m}.$$

Выполняя в этом случае интегрирование в сферических координатах, получаем

$$\begin{aligned} \text{Im } \Pi^+(q > 2k_F, \omega) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2 q} \int_{m|\omega_-|/\hbar q}^{k_F} dk k = \\ &= -\frac{m}{4\pi\hbar^2 q} \left(k_F^2 - \frac{m^2 \omega_-^2}{\hbar^2 q^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{П2.7})$$

Нижний предел в этом интеграле появился в результате требования, чтобы значение $\frac{m\omega_-}{\hbar qk}$ в интеграле по переменной $x = \cos\theta$

$$\int_{-1}^1 dx \delta\left(x - \frac{m\omega_-}{\hbar qk}\right)$$

оказалось внутри промежутка $[-1, 1]$.

Аналогичные рассуждения показывают, что во втором случае

$$\text{Im}\Pi^+(q, \omega) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2 q} \left(k_F^2 - \frac{m^2 \omega_-^2}{\hbar^2 q^2} \right), \quad (\text{П2.8})$$

где теперь $q < 2k_F$, $qv_F - \frac{\hbar q^2}{2m} \leq \omega \leq qv_F + \frac{\hbar q^2}{2m}$.

В третьей области $q < 2k_F$, $0 \leq \omega \leq qv_F - \frac{\hbar q^2}{2m}$ находим

$$\text{Im}\Pi^+(q, \omega) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 q} \int_{k_m}^{k_F} dk k = -\frac{m^2 \omega}{2\pi\hbar^3 q}, \quad (\text{П2.9})$$

где

$$k_m = \left(k_F^2 - 2 \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2}.$$

Область, в которой $\text{Im}\Pi^+ \neq 0$, заштрихована на рис. 5.18. В остальных областях на плоскости (q, ω) мнимая часть поляризационного оператора (П2.3) вырожденного электронного газа равна нулю.

Выпишем асимптотики формул (П2.2), (П2.7) и (П2.8) в важных предельных случаях:

$$\operatorname{Re} \Pi^+(q, 0) = -\frac{mk_F}{2\pi^2 \hbar^2} \left\{ 1 + \frac{k_F}{q} \left[1 - \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| \right\}, \quad (\text{П2.10})$$

$$\operatorname{Im} \Pi^+(q, 0) = 0;$$

$$\operatorname{Re} \Pi^+(q, \omega) = \frac{nq^2}{m\omega^2}, \quad \operatorname{Im} \Pi^+(0, \omega), \quad (\text{П2.11})$$

если частота ω фиксирована, а $q \rightarrow 0$;

$$\operatorname{Re} \Pi^+(q, qx) = -\frac{mk_F}{\pi^2 \hbar^2} \left(1 - \frac{x}{2} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right), \quad (\text{П2.12})$$

$$\operatorname{Im} \Pi^+(q, qx) = \begin{cases} -\frac{mk_F}{2\pi \hbar^2} x, & q \rightarrow 0, 0 \leq x \leq 1, \\ 0, & q \rightarrow 0, x > 0, \end{cases}$$

где величина $x = \omega / qv_F$ фиксирована, а $q \rightarrow 0$. В формуле

(П2.11) $n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$ – плотность электронов. Приведенные

здесь выражения для Π^+ используются в теории коллективных возбуждений и в теории экранирования в проводниках.

Задачи

1. Получите нормальное произведение фермиевских полевых операторов:

$$N \left[\psi^+(q) \psi^+(q') \psi(q') \psi(q) \right].$$

2. Найдите хронологическое произведение фермиевских полевых операторов:

$$T \left[\psi(t_1) \psi(t_2) \psi^+(t_3) \psi^+(t_4) \right].$$

3. Используя разложение полевых операторов фермионов и бозонов по произвольному базису $\{|k\rangle\}$, найдите свертку операторов $\psi_\alpha^a(\vec{r}, t) \psi_{\alpha'}^{a+}(\vec{r}', t')$.

4. Получите уравнение движения для свертки $\psi_\alpha^a(\vec{r}, t) \psi_{\alpha'}^{a+}(\vec{r}', t')$ (см. Д.А. Киржниц, Полевые методы теории многих частиц, 1963).

5. Докажите равенство

$$\begin{aligned} T \exp \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt [A(t) + B(t)] \right\} &= \\ &= N \exp \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt [A(t) + B(t)] \right\} \times \\ &\times \exp \left[\int_{t_1}^{t_2} dt'_1 \int_{t_1}^{t_2} dt'_2 A(t'_1) B(t'_2) \right], \end{aligned}$$

где операторы $A(t'')$ и $B(t'')$ коммутируют с коммутатором $[A(t), B(t')]$. Убедитесь также в том, что

$$\begin{aligned}
& T \exp \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \left[z^*(t) a(t) + z(t) a^+(t) \right] \right\} = \\
& = N \exp \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \left[z^*(t) a(t) + z(t) a^+(t) \right] \right\} \times \\
& \times \exp \left[-\eta \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{t_1}^{t_2} dt' z^*(t) a^b(t) a^{b+}(t') z(t') \right],
\end{aligned}$$

где z и z^* – переменные грассмана для фермионов ($\eta = 1$) и комплексные числа для бозонов ($\eta = -1$) (см. Ж.-П. Блейзо, Ж. Рипка, Квантовая теория конечных систем, 1998).

6. Найдите функции Грина (5.8), (5.9) и их фурье-компоненты для идеальных ферми- и бозе-газов. Сравните результат с функцией Грина в р. 1.9 (см. Д. Пайнс, Проблема многих тел, 1963).
7. Получите спектральные представления бозонных функций Грина (5.16) и (5.24).
8. Найдите представление бозонной временной функции Грина при конечной температуре, аналогичное (5.59).
9. Приведите вывод формулы, аналогичной (5.64), для бозонов.
10. Получите формулы, аналогичные (5.67), для бозонов.
11. Вычислите запаздывающую, опережающую и температурную функции Грина одномерного гармонического осциллятора в термостате.

12. Получите функции Грина (5.15), (5.16) и (5.24), а также их фурье-компоненты для электронов в магнитном поле. Рассмотрите предельный случай нулевой температуры. Покажите, что в отсутствие ферми-фона запаздывающая и опережающая функции Грина электрона в магнитном поле с векторным потенциалом $\vec{A} = (0, Hx, 0)$ равны (см. р. 1.9 и задачу 16 к этому разделу):

$$G_0^\pm(\vec{r}, \vec{r}', \varepsilon) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 l^2} \exp\left[-\frac{i}{2l^2}(x+x')(y-y')\right] \times \\ \times \exp\left[-\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2}{4l^2}\right] \times \\ \times \left[\pm i \sum_{n=0}^{n_\varepsilon-1} \exp\left(\pm i \frac{|z-z'|}{\lambda_n}\right) + \sum_{n=n_\varepsilon}^{\infty} \exp\left(-\frac{|z-z'|}{\lambda_n}\right) \right] \lambda_n(\varepsilon) \times \\ \times L_n\left[\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2}{2l^2}\right],$$

где m – масса электрона, l – магнитная длина, n_ε – целое число, при котором $\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)$ меняет знак,

$$\lambda_n(\varepsilon) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\left|\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)\right|}},$$

L_n – полином Лагерра. Используя эту формулу, найдите плотность электронных состояний в магнитном поле:

$$\nu_\sigma(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma}) = \frac{m^{3/2} \omega_c V}{2^{3/2} \pi^2 \hbar^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_{n\sigma}}},$$

где

$$\varepsilon_{n\sigma} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sigma\mu H$$

уровни Ландау, а суммирование выполняется по тем n , при которых подкоренное выражение положительно. Постройте график функции $\nu_\sigma(\varepsilon)$. Найдите G_0^\pm в случаях $\vec{A} = (-Hy, 0, 0)$, $\vec{A} = \frac{1}{2}[\vec{H}\vec{r}]$.

13. Получите упомянутые в задаче 12 функции Грина для двумерного электронного газа в магнитном поле, перпендикулярном плоскости $z = 0$, в которой движутся электроны. Вычислите плотность состояний. Рассмотрите предел нулевого поля.
14. Найдите функции Грина (5.15), (5.16), (5.24) и спектр энергии электронов в тонком кольце, на поверхности бесконечно длинного цилиндра и цилиндра конечной длины (квантовый «браслет»).
15. Решите задачу 14 при наличии магнитного поля, параллельного оси цилиндра.
16. Получите плотность электронных состояний в задачах 14, 15.
17. Вычислите термодинамические потенциалы F и Ω двумерного электронного газа в магнитном поле (см. задачу 13). Найдите энтропию, теплоемкость, намагниченность газа.
18. Получите потенциал Ω и магнитный момент электронов в кольце и на поверхности цилиндра в магнитном поле (см. задачи 14-16). Рассмотрите предел $H = 0$.

19. Вычислите функции Грина электронов в поле короткодействующих примесных атомов, хаотически распределенных в проводнике, и в магнитном поле. Рассмотрите влияние примесных атомов на термодинамические величины электронного газа. Учтите резонансное рассеяние электронов изолированными примесными центрами.
20. Используя классификацию электронных систем в цитированной книге Д.А. Киржница, рассмотрите энергетический спектр и термодинамические величины электронного газа малой и большой плотности.
21. Используйте диаграммную технику для изучения свойств фононов в кристаллах (см. Р. Маттук, фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел, 1969).
22. Получите спектр энергии квазичастиц и энергию основного состояния электронного газа в приближении Хартри-Фока с учетом магнитного поля.
23. Вычислите температурный и запаздывающий поляризационный оператор электронного газа в проводнике в приближении хаотических фаз в магнитном поле $\vec{A} = (0, Hx, 0)$. Покажите, что при $T = 0$ и $\vec{q} \parallel \vec{H}$

$$\text{Re} \Pi^+(q_z, \omega) = -\frac{m}{(2\pi\hbar l)^2 q_z} \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{n_{\sigma}} \ln \left| \frac{\left(v_{n\sigma} + \frac{\hbar q_z}{2m} \right)^2 - \left(\frac{\omega}{q_z} \right)^2}{\left(v_{n\sigma} - \frac{\hbar q_z}{2m} \right)^2 - \left(\frac{\omega}{q_z} \right)^2} \right|,$$

$$\text{Im} \Pi^+(q_z, \omega) = -\frac{\pi m}{(2\pi\hbar l)^2 q_z} \times \\ \times \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{n_{\sigma}} \int_{\nu_{n\sigma} - \frac{\hbar q_z}{2m}}^{\nu_{n\sigma} + \frac{\hbar q_z}{2m}} d\nu \left[\delta\left(\nu - \frac{\omega}{q_z}\right) - \delta\left(\nu + \frac{\omega}{q_z}\right) \right],$$

где m – эффективная масса электрона,

$$\nu_{n\sigma} = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{\mu_0 - \varepsilon_{n\sigma}}$$

– максимальная скорость электрона на уровне Ландау $\varepsilon_{n\sigma}$, μ_0

– химпотенциал электронов при $T = 0$, n_{σ} – целая часть дроби

$$\frac{\mu_0}{\hbar\omega_c} - \frac{1}{2} - \sigma \frac{\Omega_0}{2\omega_c},$$

$\Omega_0 = eH/m_0c$ – частота спинового резонанса (m_0 – масса

свободного электрона). Найдите на плоскости (q_z, ω) окна прозрачности для магнитоплазменных волн, в которых

$\text{Im} \Pi^+ = 0$ (см. В.Я. Демиховский, А.П. Протогенов, УФН, 1976, т. 118, с. 101; В.И. Окулов, В.П. Силин, Труды ФИАН, 1985, т. 158, с. 3).

24. Исследуйте влияние магнитного поля на спектр и затухание плазмонов в приближении хаотических фаз (см. А.И. Ахиезер, И.А. Ахиезер, Р.В. Половин, А.Г. Ситенко, К.Н. Степанов, Электродинамика плазмы, 1974). Рассмотрите случаи вырожденного и больцмановского электронного газа.

25. Запишите уравнения (5.190) и (5.193) в (k, ζ) -представлении.

26. Найдите поправку первого порядка к статистической сумме (5.224) электронного газа и к большому потенциалу Ω в случаях полностью вырожденного и больцмановского электронного газа.

27. Получите свободную энергию системы электронов во втором порядке теории возмущений по кулоновскому взаимодействию между ними (см. Ж-П. Блейзо, Ж. Рипка, Квантовая теория конечных систем, 1998).

28. Вычислите свободную энергию системы бозонов во втором порядке теории возмущений по межчастичному взаимодействию.

29. Найдите вклад плазмонов в свободную энергию электронного газа в приближении хаотических фаз (см. Д. Пайнс, Элементарные возбуждения в твердых телах, 1965).

30. Получите спектральное разложение функции Грина (5.37).

31. Докажите, что для любого функционала $F(a(x))$ и любого четного n справедливы равенства

$$\frac{\delta^L}{\delta a(x_1)} \dots \frac{\delta^L}{\delta a(x_n)} F(a) = \frac{\delta^R}{\delta a(x_n)} \dots \frac{\delta^R}{\delta a(x_1)} F(a),$$

$$\frac{\delta^L}{\delta a(x)} \frac{\delta^L}{\delta a(x')} = - \frac{\delta^R}{\delta a(x)} \frac{\delta^R}{\delta a(x')}.$$

32. Убедитесь в справедливости равенств

$$\exp(-aA) F\left(\frac{\delta^L}{\delta a}\right) \exp(aA) = F\left(a + \frac{\delta^L}{\delta a}\right),$$

$$\exp\left(A \frac{\delta^L}{\delta a}\right) F(a) = F(a + A),$$

где $a(x)$ и $A(x)$ – пара антикоммутирующих полей,

$$aA = \int dx a(x) A(x),$$

$$A \frac{\delta^L}{\delta a} = \int dx A(x) \frac{\delta^L}{\delta a(x)},$$

операция $\delta^L / \delta a$ антикоммутирует с A (см. А.Н. Васильев, Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике, 1976).

33. Получите вклад диаграмм на рис. 5.28 в термодинамические функции электронной жидкости.

34. Убедитесь в том, что производящий функционал одномерного ангармонического осциллятора с лагранжианом

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 - \frac{\lambda}{4} x^4 + Jx$$

$$(\lambda > 0)$$

в поле источника $J(t)$ может быть представлен в виде

$$Z[J] = Z_0[0] \exp \left[-\frac{i\lambda}{4\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(-i\hbar \frac{\delta}{\delta J(t)} \right)^4 \right] \times \\ \times \exp \left[-\frac{i}{2\hbar m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt' dt'' J(t') G_F(t' - t'') J(t'') \right],$$

где

$$Z_0[J] = N \int Dx \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 + Jx \right) \right] = \\ = Z_0[0] \exp \left[-\frac{i}{2\hbar m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt' dt'' J(t') G_F(t' - t'') J(t'') \right]$$

– производящий функционал, а

$$G_F(t' - t'') = -\frac{im}{\hbar} \langle 0 | T [x(t') x(t'')] | 0 \rangle = \\ = -\frac{im}{\hbar} (-i\hbar)^2 \frac{1}{Z_0[J]} \frac{\delta^2 Z_0[J]}{\delta J(t') \delta J(t'') |_{J=0}}$$

– фейнмановский пропагатор гармонического осциллятора ($|0\rangle$ – состояние вакуума, N – нормировочная константа). При $\lambda \ll 1$ получите ряд теории возмущений для $Z[J]$. См. A. Das, Field Theory, 2006.

Навчальне видання

Єрмолаєв Олександр Михайлович

Рашба Георгій Ілліч

Лекції з квантової статистики і кінетики
5. Функції Гріна в квантовій статистиці

Російською мовою

Друкується в авторській редакції

Відповідальний за випуск О.І. Любимов

Підп. до друку .09. Формат 60x84 1/16. Папір офсетний.
Друк ризографічний. Ум. друк. арк. . Обл.-вид. арк. .
Наклад 50 прим. Ціна договірна.

61077, Харків, майдан Свободи, 4
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Організаційно-видавничий відділ НМЦ

Надруковано ФОП “Петрова І.В.”
61144, Харків-144, вул. Гв. Широнінців 79-в, к. 137
Свідоцтво про державну реєстрацію ВОО № 948011
від 03.01.03