ГЛАВА 21

Применение функций Грина в физике твердого тела

В публикуемых работах по теоретической физике твердого тела и, в частности, в работах, связанных с проблемой многих тел, получило широкое распространение использование функций Грина. Метод функций Грина представляет собой, в сущности, просто особый метод общей формулировки квантовомеханических задач. Его преимущество состоит в том, что часто он оказывается весьма непосредственным и гибким; иногда, например, в некоторых задачах, где надо учитывать спин, он неудобен, так как маскирует физическую природу приближений, которые приходится вводить в ходе его использования. Этот метод позволяет естественным путем вводить матричные элементы, связывающие состояния с разным числом частиц; с такими элементами мы имели дело, например, при рассмотрении сверхтекучести (см. гл. 2) и сверхпроводимости (см. гл. 8). Задача настоящей главы — поближе познакомить читателя со свойствами функций Грина, дать представление о том, как они применяются, и показать, что они имеют самое непосредственное отношение к проблеме многих тел.

Основная литература, рекомендуемая для более подробного изучения — это монографии [1—3] [1]). Из отдельных оригинальных работ обращаем внимание читателей на статьи, репринты которых включены в качестве приложения в американское издание книги Пайнса [4], в частности работы Беляева [5], Галицкого и Мигдала [6].

Одночастичная функция Грина описывает движение одной частицы, добавленной в систему многих частиц. Двухчастичная функция Грина описывает движение двух добавленных частиц. Функцию Грина называют термодинамической, или температурной, функцией Грина, если система находится в каком-то большом каноническом ансамбле при ненулевой температуре.

---

[1]) Следует указать также монографию Бонч-Бруевича и Тябликова [8] и оригинальный обзор Зубарева [9]. *(Прим. перев.)*

Ранее мы уже говорили (см. задачу 5.4), что оператор $\Psi^+(\mathbf{x})$ «добавляет» частицу в точку с координатой $\mathbf{x}$ к вакуумному состоянию, на которое действует данный оператор. Здесь мы приведем доказательство этого утверждения. Оператор плотности частиц имеет вид

$$\rho(\mathbf{x}') = \int d^3x'' \Psi^+(\mathbf{x}'') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \Psi(\mathbf{x}''), \tag{21.1}$$

и поэтому

$$\rho(\mathbf{x}') \Psi^+(\mathbf{x}) |\text{вак}\rangle = \int d^3x'' \Psi(\mathbf{x}'') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \Psi(\mathbf{x}'') \Psi^+(\mathbf{x}) |\text{вак}\rangle =$$

$$= \int d^3x'' \Psi^+(\mathbf{x}'') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') |\text{вак}\rangle, \tag{21.2}$$

поскольку $\Psi(\mathbf{x}'')|\text{вак}\rangle = 0$. Итак,

$$\rho(\mathbf{x}') \Psi^+(\mathbf{x}) |\text{вак}\rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Psi^+(\mathbf{x}) |\text{вак}\rangle, \tag{21.3}$$

т. е. мы пришли к результату, который хотели получить.

Обозначение $\Psi^+(\mathbf{x}\,t)$ для оператора в гейзенберговском представлении показывает, что частица, добавленная в точку $\mathbf{x}$, появляется там в момент t. Действие оператора $\Psi(\mathbf{x}\,t)$ на функцию $\Psi^+(\mathbf{x}t)\,|\text{вак}\rangle$ сводится к удалению добавленной частицы. Оператор $\Psi(\mathbf{x}'t')$, «добавляющий» частицу в точку $\mathbf{x}'$ в более поздний момент времени $t'\,(t'>t)$, служит мерой амплитуды вероятности того, что частица, добавленная в точку $\mathbf{x}$ в момент t, перешла в точку $\mathbf{x}'$ и оказалась там в момент t'. Наиболее важные стороны динамического поведения частицы, добавляемой в систему в некотором ее состоянии, для моментов $t'>t$ можно, следовательно, описывать функцией

$$\Psi(\mathbf{x}'t') \Psi^+(\mathbf{x}t) |\rangle.$$

Удобно иметь дело с квантовомеханическим средним этой величины, т. е. с

$$\langle | \Psi(\mathbf{x}'t') \Psi^+(\mathbf{x}t) | \rangle, \tag{21.4}$$

или со статистическим средним, взятым по большому каноническому ансамблю, т. е. с

$$\langle \Psi(\mathbf{x}'t') \Psi^+(\mathbf{x}t) \rangle = \operatorname{Sp} \rho \Psi(\mathbf{x}'t') \Psi^+(\mathbf{x}t), \tag{21.5}$$

где ρ — соответствующий статистический оператор. Величина (21.4) (или (21.5)) является, в сущности, корреляционной функцией и очень удобна для описания квазичастиц.

Есть некоторые основания к тому, чтобы обобщить (21.4) или (21.5) и пользоваться затем уже обобщенной формой. Чтобы проиллюстрировать это, рассмотрим невозмущенное основное состояние ферми-газа как конкретный пример состояния системы. Оператор Ψ^+ разобьем на две части $\Psi^+ = \Psi_e^+ + \Psi_h$, где Ψ_e^+ — оператор рождения, определенный для электронных состояний $k > k_F$, а Ψ_h — оператор уничтожения дырок для $k < k_F$. Можно тогда записать

$$\Psi(1')\Psi^+(1) = \Psi_e(1')\Psi_e^+(1) + \Psi_h^+(1')\Psi_h(1) + \\ + \Psi_e(1')\Psi_h(1) + \Psi_h^+(1')\Psi_e^+(1), \quad (21.6)$$

где $1' \equiv \mathbf{x}'t'$, $1 \equiv \mathbf{x}t$. В среднее значение величины (21.6) в невозмущенном основном состоянии дает вклад только один член, а именно $\Psi_e(1')\Psi_e^+(1)$, так что произведение $\Psi(1')\Psi^+(1)$ годится для изучения движения добавленного электрона, но не добавленной дырки. С другой стороны, оператор

$$\Psi^+(1)\Psi(1') = \Psi_e^+(1)\Psi_e(1') + \Psi_h(1)\Psi_h^+(1') + \\ + \Psi_h(1)\Psi_e(1') + \Psi_e^+(1)\Psi_h^+(1') \quad (21.7)$$

годится для изучения движения добавленной дырки при условии $t > t'$, поскольку среднее значение $\Psi_h(1)\Psi_h^+(1')$ не обращается в нуль. Заметим далее, что

$$P(\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t)) = \begin{cases} \Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t), & \text{если } t' > t, \\ \Psi^+(\mathbf{x}t)\Psi(\mathbf{x}'t'), & \text{если } t > t', \end{cases} \quad (21.8)$$

где P — хронологический оператор Дайсона, который упорядочивает последовательность операторов в произведении так, что каждый следующий (считая слева направо) относится к более раннему моменту времени. Для рассмотрения фермионных полей удобнее исходить из соотношений коммутации для операторов, относящихся к одному и тому же моменту времени. Для этой цели используют хронологический оператор Вика T, определяемый соотношениями

$$T(\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t)) = \begin{cases} \Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t), & \text{если } t' > t, \\ -\Psi^+(\mathbf{x}t)\Psi(\mathbf{x}'t'), & \text{если } t > t'. \end{cases} \quad (21.9)$$

Если операторы Ψ и Ψ^+ антикоммутируют, то мы всегда будем иметь $T(\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t)) = \Psi(\mathbf{x}'t')\Psi(\mathbf{x}t)$. Для бозонных полей операторы T и P совпадают.

Для всей временной области функция Грина определяется[1]) следующим образом:

$$\boxed{G(\mathbf{x}'t';\ \mathbf{x}t) = -i\langle T(\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t))\rangle.} \tag{21.10}$$

Для основного состояния имеем

$$G(\mathbf{x}'t';\ \mathbf{x}t) = -i\langle 0|T(\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t))|0\rangle. \tag{21.11}$$

Полевые операторы берутся в гейзенберговском представлении. Из изложенного выше ясно, что, используя всю временную область, мы получим больше информации, чем в том случае, если мы ограничимся значениями $t'>t$. Двухчастичная функция Грина определяется аналогичным образом, т. е.

$$K(1234) = \langle T(\Psi(1)\Psi(2)\Psi^+(3)\Psi^+(4))\rangle, \tag{21.12}$$

где 1 означает $\mathbf{x}_1 t_1$ и т. д.

Если система инвариантна по отношению к преобразованиям Галилея и, кроме того, по отношению к поворотам, то функции Грина можно записывать в относительных координатах. Так, например, (21.10) примет вид

$$\boxed{G(\mathbf{x}t) = -i\langle T(\Psi(\mathbf{x}t)\Psi^+(00))\rangle.} \tag{21.13}$$

В качестве тривиального примера рассмотрим одномерную систему невзаимодействующих фермионов в чисто вакуумном состоянии, которое будем описывать функцией $|\text{вак}\rangle$. Естественно разложить $\Psi(xt)$ в ряд по собственным функциям свободных частиц, т. е. записать

$$\Psi(xt) = \sum_k c_k(t)\, e^{ikx} = \sum_k c_k e^{-i\omega_k t} e^{ikx}, \tag{21.14}$$

где $\omega_k = k^2/2m$. Тогда одночастичная функция Грина для вакуумного состояния будет иметь вид

$$\begin{aligned} G_v(xt) &= -i\langle \text{вак}|\Psi(xt)\Psi^+(00)|\text{вак}\rangle = \\ &= i\langle \text{вак}|T\Big(\sum_{kk'} c_k c_{k'}^+ e^{-i\omega_k t} e^{ikx}\Big)|\text{вак}\rangle = -i\sum_k e^{ikx} e^{-i\omega_k t}. \end{aligned} \tag{21.15}$$

---

[1]) Некоторые авторы в определении одночастичной функции Грина берут i вместо $-i$. В приведенном нами определении с $-i$ функция Грина для свободного электронного газа с учетом (21.14), (21.17) и (21.18) удовлетворяет уравнению

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2}\right) G_0(\mathbf{x}t) = \delta(\mathbf{x})\,\delta(t),$$

из которого видно, что функция G_0 аналогична обычной функции Грина для уравнения Шредингера.

Это выражение справедливо для $t>0$ и равно нулю для всех других значений t. Заметим, что $G_v(x,+0)=-i\sum_k e^{ikx}=$ $=-i\delta(x)$. Заменяя суммирование интегрированием, получим (для $t>0$)

$$G_v(xt)=-i\int_{-\infty}^{\infty} dk\exp\left[i\left(kx-\frac{1}{2m}k^2t\right)\right]=$$
$$=\exp\left(-\frac{i3\pi}{4}\right)\left(\frac{2\pi m}{t}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{imx^2}{2t}\right). \qquad (21.16)$$

Как легко видеть, эта функция является решением уравнения Шредингера, зависящего от времени.

Вычисление функции $G(xt)$ для основного состояния $|0\rangle$ невзаимодействующего ферми-газа (в одномерном случае) предоставляется читателю (см. задачу 21.1). Здесь мы ограничимся просто утверждением, что для этой задачи

$$G_0(x,+0)=-\frac{i}{2\pi}\left[\int_{k_F}^{\infty}+\int_{-\infty}^{-k_F}\right]dke^{ikx}=$$
$$=-\frac{i}{2\pi}\left[2\pi\delta(x)-\int_{-k_F}^{k_F}dke^{ikx}\right]=-\frac{i}{2\pi}\left[2\pi\delta(x)-2\frac{\sin k_Fx}{\pi x}\right]; \qquad (21.17)$$

$$G_0(x,-0)=\frac{i}{2\pi}\int_{-k_F}^{k_F}dke^{ikx}=i\frac{\sin k_Fx}{\pi x}. \qquad (21.18)$$

Здесь следует отметить, что эти результаты имеют иной вид, чем результат (21.15); последний был получен для вакуума.

Преобразования Фурье. В разработке и применениях метода функций Грина широко используются фурье-образы этих функций, а именно $G(\mathbf{k}t)$ и $G(\mathbf{k}\omega)$. Функцию $G(\mathbf{k}t)$ мы определим обычным путем, т. е.

$$G(\mathbf{k}t)=\int d^3xe^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}G(\mathbf{x}t); \qquad (21.19)$$

имеет место и обратное преобразование

$$G(\mathbf{x}t)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3ke^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}G(\mathbf{k}t). \qquad (21.20)$$

Функция $G(\mathbf{k}\omega)$ определяется через функцию $G(\mathbf{k}t)$:

$$G(\mathbf{k}\omega)=\int dte^{i\omega t}G(\mathbf{k}t); \qquad (21.21)$$

здесь также имеет место обратное преобразование

$$G(\mathbf{k}t)=\frac{1}{2\pi}\int d\omega e^{-i\omega t}G(\mathbf{k}\omega). \tag{21.22}$$

Невзаимодействующий фермионный газ. Одночастичная функция Грина $G_0(\mathbf{k}t)$ для основного состояния невзаимодействующего фермионного газа имеет вид

$$G_0(\mathbf{k}t)=-i\langle 0|T\left(\sum_{\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k}'}^{+}e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}\int d^3x\exp[i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}]\right)|0\rangle=$$

$$=\begin{cases}-i\langle 0|c_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}}^{+}|0\rangle e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} & \text{для } t>0,\\ i\langle 0|c_{\mathbf{k}}^{+}c_{\mathbf{k}}|0\rangle e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} & \text{для } t<0.\end{cases} \tag{21.23}$$

Если $n_{\mathbf{k}}$, равное 1 или 0, — числа заполнения состояния $\mathbf{k}$ в основном состоянии, то

$$G_0(\mathbf{k}t)=\begin{cases}-ie^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}(1-n_{\mathbf{k}}) & \text{для } t>0,\\ ie^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}n_{\mathbf{k}} & \text{для } t<0\end{cases} \tag{21.24}$$

и, следовательно,

$$G_0(\mathbf{k},\ +0)-G_0(\mathbf{k},\ -0)=-i.$$

Мы можем ожидать, что для возбуждения квазичастицы в реальном (взаимодействующем) ферми-газе при $t>0$ (для ограниченного интервала времени) временная зависимость функции $G(\mathbf{k}t)$ будет иметь вид

$$e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}e^{-\Gamma_{\mathbf{k}}t},$$

где $1/\Gamma_{\mathbf{k}}$ — время жизни возбуждения (квазичастицы), т. е. интервал времени от момента его образования до момента распада на другие возбуждения.

Далее покажем, что

$$G_0(\mathbf{k}\omega)=\lim_{s_{\mathbf{k}}\to 0}\frac{1}{\omega-\omega_{\mathbf{k}}+is_{\mathbf{k}}}, \tag{21.25}$$

где $s_{\mathbf{k}}$ положительно при $k>k_F$ и $s_{\mathbf{k}}$ отрицательно при $k<k_F$. Покажем, что выражение (21.25) для $G_0(\mathbf{k}\omega)$ находится в согласии с результатом (21.24) для $G_0(\mathbf{k}t)$. Рассмотрим случай $k>k_F$. Для этой области значений k из (21.24) следует, что

$$G_0(\mathbf{k}t)=\begin{cases}-ie^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} & \text{при } t>0,\\ 0 & \text{при } t<0.\end{cases} \tag{21.26}$$

Далее из выражения (21.25) получим для значений $k > k_F$

$$G_0(\mathbf{k}t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} G_0(k\omega) =$$
$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}\left[\mathcal{P}\frac{1}{\omega-\omega_{\mathbf{k}}} - i\pi\,\delta(\omega-\omega_{\mathbf{k}})\right]. \quad (21.27)$$

При $t > 0$ соответствующий контурный интеграл можно взять по бесконечной полуокружности в нижней полуплоскости. Мы видим, что

$$\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\frac{e^{-i\omega t}}{\omega-\omega_{\mathbf{k}}} = -i\pi e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \qquad t > 0, \quad (21.28)$$

а поскольку

$$-i\pi\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}\,\delta(\omega-\omega_{\mathbf{k}}) = -i\pi e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad (21.29)$$

то для $G_0(\mathbf{k}t)$ окончательно имеем

$$G_0(\mathbf{k}t) = -ie^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad t > 0; \quad k > k_F. \quad (21.30)$$

Для $t < 0$ в качестве контура интегрирования (21.28) следует брать полуокружность в верхней полуплоскости, т. е.

$$\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\frac{e^{-i\omega t}}{\omega-\omega_{\mathbf{k}}} = i\pi e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \qquad t < 0. \quad (21.31)$$

Таким образом,

$$G_0(\mathbf{k}t) = 0, \qquad t < 0, \qquad k > k_F. \quad (21.32)$$

Для значений $k < k_F$ мы изменяем знак $s_{\mathbf{k}}$ в (21.25); при этом изменяется знак перед дельта-функцией в (21.27), и мы имеем

$$G_0(\mathbf{k}t) = \begin{cases} 0, & t > 0, \quad k < k_F, \\ ie^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, & t < 0, \quad k < k_F. \end{cases} \quad (21.33)$$

Взаимодействующий фермионный газ. Функция Грина для точного основного состояния $|0\rangle$ взаимодействующего фермионного газа имеет следующий вид:

$$G_0(\mathbf{k}t) = -i\langle 0|T(c_{\mathbf{k}}(t)c_{\mathbf{k}}^+(0))|0\rangle =$$
$$= \begin{cases} -i\langle 0|e^{iHt}c_{\mathbf{k}}e^{-iHt}c_{\mathbf{k}}^+|0\rangle, & t > 0, \\ i\langle 0|c_{\mathbf{k}}^+e^{iHt}c_{\mathbf{k}}e^{-iHt}|0\rangle, & t < 0. \end{cases} \quad (21.34)$$

Здесь H — точный гамильтониан. Обозначим через E_0^N энергию системы N частиц, находящихся в точном основном состоянии. Тогда

$$G(\mathbf{k}t)=\begin{cases} -i\langle 0|c_{\mathbf{k}}e^{-iHt}c_{\mathbf{k}}^{+}|0\rangle \exp\left[iE_0^N t\right], & t>0, \\ i\langle 0|c_{\mathbf{k}}^{+}e^{iHt}c_{\mathbf{k}}|0\rangle \exp\left[-iE_0^N t\right], & t<0. \end{cases} \tag{21.35}$$

Для возбужденных состояний системы, в которую добавлена одна частица, т. е. системы из $N+1$ частиц (и аналогично для системы из $N-1$ частиц), введем индекс n. Тогда (21.35) можно переписать в форме

$$G(\mathbf{k}t)=\begin{cases} -i\sum_n \langle 0|c_{\mathbf{k}}e^{-iHt}|n\rangle \langle n|c_{\mathbf{k}}^{+}|0\rangle \exp\left[iE_0^N t\right], & t>0, \\ i\sum_n \langle 0|c_{\mathbf{k}}^{+}e^{iHt}|n\rangle \langle n|c_{\mathbf{k}}|0\rangle \exp\left[-iE_0^N t\right], & t<0. \end{cases} \tag{21.36}$$

При $t>0$ состояния с индексом n являются возбужденными состояниями системы из $N+1$ частиц; при $t<0$ индекс n относится к возбужденным состояниям системы из $N-1$ частиц. Тогда (21.36) можно представить в виде

$$G(\mathbf{k}t)=\begin{cases} -i\sum_n |\langle n|c_{\mathbf{k}}^{+}|0\rangle|^2 \exp\left[-i\left(E_n^{N+1}-E_0^N\right)t\right], & t>0, \\ i\sum_n |\langle n|c_{\mathbf{k}}|0\rangle|^2 \exp\left[i\left(E_n^{N-1}-E_0^N\right)t\right], & t<0. \end{cases} \tag{21.37}$$

Показатели экспонент в (21.37) можно несколько преобразовать. Действительно,

$$E_n^{N+1}-E_0^N=\left(E_n^{N+1}-E_0^{N+1}\right)+\left(E_0^{N+1}-E_0^N\right)\approx\omega_n+\mu,$$
$$E_n^{N-1}-E_0^N=\left(E_n^{N-1}-E_0^{N-1}\right)+\left(E_0^{N-1}-E_0^N\right)\approx\omega_n-\mu, \tag{21.38}$$

где

$$\omega_n\approx E_n^{N\pm 1}-E_0^{N\pm 1} \tag{21.39}$$

есть энергии возбуждения, отсчитываемые от основного состояния системы $N\pm 1$ частиц, а

$$\mu=\frac{\partial E}{\partial N}\approx E_0^{N+1}-E_0^N\approx E_0^N-E_0^{N-1} \tag{21.40}$$

— химический потенциал. Для больших систем ($N\gg 1$) нет необходимости писать верхние индексы у ω_n или μ, чтобы отличать случай системы из N частиц от случаев $N\pm 1$ частиц. Итак, (21.37) примет следующий вид:

$$G(\mathbf{k}t)=\begin{cases} -i\sum_n |\langle n|c_{\mathbf{k}}^{+}|0\rangle|^2 \exp\left[-i(\omega_n+\mu)t\right], & t>0, \\ i\sum_n |\langle n|c_{\mathbf{k}}|0\rangle|^2 \exp\left[i(\omega_n-\mu)t\right], & t<0. \end{cases} \tag{21.41}$$

Спектральная плотность и представление Лемана. Введем функцию спектральной плотности, определив ее следующими соотношениями:

$$\rho^{+}(\mathbf{k}\omega) \equiv \sum_{n} |\langle n|c_{\mathbf{k}}^{+}|0\rangle|^{2}\,\delta(\omega-\omega_{n}), \qquad (21.42)$$

$$\rho^{-}(\mathbf{k}\omega) \equiv \sum_{n} |\langle n|c_{\mathbf{k}}|0\rangle|^{2}\,\delta(\omega-\omega_{n}). \qquad (21.43)$$

Для этих функций применяются также обозначения $A(\mathbf{k}\omega) \equiv \equiv \rho^{+}(\mathbf{k}\omega)$ и $B(\mathbf{k}\omega) \equiv \rho^{-}(\mathbf{k}\omega)$. В наших обозначениях (вводя (21.42), (21.43)) выражения (21.41) примут следующий вид:

$$G(\mathbf{k}t) = \begin{cases} -i\int\limits_{0}^{\infty} d\omega\rho^{+}(\mathbf{k}\omega)\exp[-i(\omega+\mu)t], & t>0, \\ i\int\limits_{0}^{\infty} d\omega\rho^{-}(\mathbf{k}\omega)\exp[i(\omega-\mu)t], & t<0. \end{cases} \qquad (21.44)$$

Интеграл по $d\omega$ нужно брать только для положительных ω, поскольку значения ω_{n} всегда положительны.

Для невзаимодействующих фермионов функции спектральной плотности сводятся к обычным дельта-функциям, т. е.

$$\rho^{+}(\mathbf{k}\omega) = (1-n_{\mathbf{k}})\,\delta(\omega-\omega_{\mathbf{k}}+\mu), \qquad (21.45)$$

$$\rho^{-}(\mathbf{k}\omega) = n_{\mathbf{k}}\,\delta(\omega-\mu+\omega_{\mathbf{k}}), \qquad (21.46)$$

где $n_{\mathbf{k}}$, равное 1 или 0, — числа заполнения для основного состояния, а $\omega_{\mathbf{k}} = k^{2}/2m$. В этом случае выражения (21.44) примут вид

$$G_{0}(\mathbf{k}t) = \begin{cases} -i\exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t)(1-n_{\mathbf{k}}), & t>0, \\ i\exp[-i\omega_{\mathbf{k}}t]\,n_{\mathbf{k}}, & t<0, \end{cases} \qquad (21.47)$$

что полностью согласуется с полученными ранее выражениями (21.24).

Теперь приведем следующий важный результат, известный под названием представления Лемана:

$$G(\mathbf{k}\omega) = \lim_{s\to+0}\int\limits_{0}^{\infty} d\omega'\left[\frac{\rho^{+}(\mathbf{k}\omega')}{(\omega-\mu)-\omega'+is} + \frac{\rho^{-}(\mathbf{k}\omega')}{(\omega-\mu)+\omega'-is}\right]. \qquad (21.48)$$

В справедливости этого результата легко убедиться, взяв фурье-образ функции $G(\mathbf{k}t)$ в виде (21.44); в самом деле,

$$G(\mathbf{k}\omega)=\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G(\mathbf{k}t)=$$

$$=\lim_{s\to+0}\left[-i\int_0^\infty dt \exp[i(\omega+is)t]\int_0^\infty d\omega' \rho^+(\mathbf{k}\omega')\exp[-i(\omega'+\mu)t]+\right.$$

$$\left.+i\int_{-\infty}^0 dt \exp[i(\omega-is)t]\int_0^\infty d\omega' \rho^-(\mathbf{k}\omega')\exp[i(\omega'-\mu)t]\right]. \quad (21.49)$$

Первое слагаемое в квадратных скобках сводится к выражению

$$-i\int_0^\infty dt \exp[i(\omega-\omega'-\mu+is)t]=\frac{1}{(\omega-\mu)-\omega'+is}, \quad (21.50)$$

а второе — к выражению

$$i\int_{-\infty}^0 dt \exp[i(\omega+\omega'-\mu-is)t]=\frac{1}{(\omega-\mu)+\omega'-is}. \quad (21.51)$$

Комбинируя (21.50), (21.51) и (21.49), получим (21.48).

Дисперсионные соотношения. Из определений (21.42) и (21.43) легко видеть, что ρ^+ и ρ^- — вещественные величины. Используя известное символическое равенство

$$\lim_{s\to+0}\frac{1}{\varepsilon\pm is}=\mathcal{P}\frac{1}{\varepsilon}\mp i\pi\delta(\varepsilon) \quad (21.52)$$

в представлении Лемана (21.48), мы можем выделить вещественную и мнимую части $G(\mathbf{k}\omega)$. Для мнимой части получим

$$\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k}\omega)\}=$$

$$=-\pi\int_0^\infty d\omega' [\rho^+(\mathbf{k}\omega')\delta(\omega-\mu-\omega')-\rho^-(\mathbf{k}\omega')\delta(\omega-\mu+\omega')=$$

$$=\begin{cases}-\pi\rho^+(\mathbf{k},\ \omega-\mu), & \omega>\mu,\\ \pi\rho^-(\mathbf{k},\ \mu-\omega), & \omega<\mu.\end{cases} \quad (21.53)$$

Отделение мнимой части облегчилось тем, что интеграл берется только по положительным значениям ω'. Заметим, что ρ^+ и ρ^-, по определению, неотрицательны, и поэтому $\operatorname{Im}\{G\}$ при $\omega=\mu$ изменяет знак.

Вычислим теперь вещественную часть $G(\mathbf{k}\omega)$ и выразим результат через мнимую часть. Мы получим выражение, аналогичное соотношению Крамерса — Кронига. Действительно, воспользовавшись (21.52), получим

$$\operatorname{Re}\{G(\mathbf{k}\omega)\} = \mathscr{P}\int_0^\infty d\omega'\left[\frac{\rho^+(\mathbf{k}\omega')}{(\omega-\mu)-\omega'} + \frac{\rho^-(\mathbf{k}\omega')}{(\omega-\mu)+\omega'}\right]; \quad (21.54)$$

отсюда, учитывая (21.53), находим

$$\operatorname{Re}\{G(\mathbf{k}\omega)\} = \mathscr{P}\frac{1}{\pi}\int_0^\infty d\omega'\left[-\frac{\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k},\ \omega'+\mu)\}}{(\omega-\mu)-\omega'} + \frac{\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k},\ \mu-\omega')\}}{(\omega-\mu)+\omega'}\right]. \quad (21.55)$$

Произведем в соответствующих частях интеграла подстановки $\omega''=\omega'+\mu$ и $\omega''=\mu-\omega'$; тогда

$$\operatorname{Re}\{G(\mathbf{k}\omega)\} = -\mathscr{P}\frac{1}{\pi}\int_\mu^\infty d\omega''\frac{\operatorname{Im}\{\mathbf{k}\omega''\}}{\omega-\omega''} + \mathscr{P}\frac{1}{\pi}\int_\mu^{-\infty}(-d\omega'')\frac{\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k}\omega'')\}}{\omega-\omega''}, \quad (21.56)$$

или

$$\boxed{\operatorname{Re}\{G(\mathbf{k}\omega)\} = \mathscr{P}\frac{1}{\pi}\left[\int_\mu^\infty - \int_{-\infty}^\mu\right]d\omega''\frac{\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k}\omega'')\}}{\omega''-\omega}.} \quad (21.57)$$

Энергия основного состояния. Если можно считать, что в системе существуют лишь двухчастичные взаимодействия, то энергия основного состояния определяется одночастичной функцией Грина.

Доказательство. Из (21.34) вытекает, что среднее значение числа заполнения $n_\mathbf{k}$ состояния $\mathbf{k}$ определяется выражением

$$n_\mathbf{k} = \langle 0|c_\mathbf{k}^+ c_\mathbf{k}|0\rangle = -iG(\mathbf{k},\ -0). \quad (21.58)$$

Далее, учитывая (21.22), получим

$$n_\mathbf{k} = \frac{1}{2\pi i}\int_c d\omega G(\mathbf{k}\omega), \quad (21.59)$$

где c — контур, состоящий из вещественной оси и полуокружности бесконечного радиуса в верхней полуплоскости, поскольку $t=-0$.

Представим H в виде $H=H_0+H_1$, где

$$H_0=\sum \omega_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{+} c_{\mathbf{k}} \tag{21.60}$$

и

$$H_1=\sum V(\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_4)\, c_{\mathbf{k}_1}^{+} c_{\mathbf{k}_2}^{+} c_{\mathbf{k}_3} c_{\mathbf{k}_4}. \tag{21.61}$$

Тогда, как легко видеть,

$$\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{+}\left[H_0, c_{\mathbf{k}}\right]=-H_0 \tag{21.62}$$

и

$$\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{+}\left[H_1, c_{\mathbf{k}}\right]=-2H_1. \tag{21.63}$$

Следовательно,

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle 0| c_{\mathbf{k}}^{+}\left[H, c_{\mathbf{k}}\right]|0\rangle=-\langle 0|H_0+2H_1|0\rangle. \tag{21.64}$$

Энергию основного состояния E_0 можно записать в виде

$$E_0=\langle 0|H_0+H_1|0\rangle=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\left(\omega_{\mathbf{k}}-\langle 0|c_{\mathbf{k}}^{+}\left[H, c_{\mathbf{k}}\right]|0\rangle\right). \tag{21.65}$$

Заметим далее, что, согласно (21.42),

$$\langle 0|c_{\mathbf{k}}^{+}\left[H, c_{\mathbf{k}}\right]|0\rangle=\int_0^{\infty} d\omega \rho^{-}(\mathbf{k}\omega)(\omega-\mu), \tag{21.66}$$

откуда, согласно (21.44) и (21.22), находим

$$\int_0^{\infty} d\omega \rho^{-}(\mathbf{k}\omega)(\omega-\mu)=-\left[\frac{dG(\mathbf{k}t)}{dt}\right]_{t=-0}=\frac{i}{2\pi}\int_C d\omega\omega G(\mathbf{k}\omega). \tag{21.67}$$

Тогда выражение (21.65) можно переписать в виде

$$E_0=\frac{1}{4\pi i}\sum_{\mathbf{k}}\int_C d\omega(\omega_{\mathbf{k}}+\omega)\, G(\mathbf{k}\omega), \tag{21.68}$$

что и требовалось доказать. Это точный результат.

Тепловые средние. При использовании метода функций Грина были разработаны изящные приемы нахождения статистических средних (по ансамблю). В качестве простого примера рассмотрим точный и короткий вывод законов распределения для бозонов и фермионов. Вычислим тепловое среднее для чисел заполнения; по определению

$$n=\langle a^{+}a\rangle=\frac{\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}a^{+}a}{\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}}. \tag{21.69}$$

Здесь $\hat{H}=H-\mu\hat{N}$, $\beta=1/k_BT$, а операторы a^+, a удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$aa^+-\eta a^+a=1, \tag{21.70}$$

где $\eta=1$ для бозонов и $\eta=-1$ для фермионов. В силу инвариантности шпура относительно циклических перестановок операторов, имеем

$$\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}a^+a=\operatorname{Sp} ae^{-\beta H}a^+=\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}ae^{-\beta\hat{H}}a^+e^{\beta\hat{H}}. \tag{21.71}$$

Однако для любой собственной функции Φ системы невзаимодействующих частиц справедливо соотношение

$$e^{-\beta\hat{H}}a^+e^{\beta\hat{H}}\Phi=e^{-\beta(\omega-\mu)}a^+\Phi, \tag{21.72}$$

и поэтому

$$\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}a^+a=e^{-\beta(\omega-\mu)}\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}aa^+=e^{-\beta(\omega-\mu)}\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}(1+\eta a^+a). \tag{21.73}$$

Следовательно,

$$n=e^{-\beta(\omega-\mu)}(1+\eta n), \tag{21.74}$$

или

$$n=\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)}-\eta}, \tag{21.75}$$

что является обычным результатом.

Тем же путем можно без труда показать, что среднее по каноническому ансамблю от произведения двух произвольных операторов A и B удовлетворяет соотношению

$$\langle A(t)B(0)\rangle=\langle B(0)A(t+i\beta)\rangle. \tag{21.76}$$

Полезно заново вывести дисперсионное соотношение (21.57) путем вычисления среднего по большому каноническому ансамблю, используя так называемый большой термодинамический потенциал Ω. Заметим прежде всего, что

$$|\langle m|c_{\mathbf{k}}^+|n\rangle|^2=|\langle n|c_{\mathbf{k}}|m\rangle|^2. \tag{21.77}$$

Тогда полученный нами выше результат (21.37) можно преобразовать. Вводя статистический оператор

$$\rho=\exp[\beta(\Omega+\mu\hat{N}-H)] \tag{21.78}$$

и $\omega_{nm}=E_n-E_m$, получим

$$G(\mathbf{k}t)=\begin{cases} -i\sum\limits_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_n-E_n)]|\langle n|c_{\mathbf{k}}|m\rangle|^2\exp(i\omega_{nm}t), & t>0; \\ i\sum\limits_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_n-E_n)]|\langle m|c_{\mathbf{k}}|n\rangle|^2\exp(i\omega_{mn}t), & t<0. \end{cases} \tag{21.79}$$

Далее, в выражении для $t<0$ переставим индексы n и m; тогда

$$G(\mathbf{k}t)=i\sum_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_m-E_m)]\times \times|\langle n|c_\mathbf{k}|m\rangle|^2\exp(i\omega_{nm}t),\qquad t<0. \tag{21.80}$$

Поскольку $N_n=N_m-1$, можно записать

$$G(\mathbf{k}t)=i\sum_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_n-E_n)]\exp[\beta(\omega_{nm}+\mu)]\times \times|\langle n|c_\mathbf{k}|m\rangle|^2\exp[i\omega_{nm}t],\qquad t<0. \tag{21.81}$$

Теперь возьмем фурье-образ этой функции по времени, разделив область интегрирования на две: $(-\infty, 0)$ и $(0, +\infty)$. Воспользовавшись тождествами

$$\lim_{s\to+0}\int_0^\infty dx\exp[i(\alpha+is)x]=\pi\delta(\alpha)+i\mathscr{P}\frac{1}{\alpha}, \tag{21.82}$$

$$\lim_{s\to+0}\int_{-\infty}^0 dx\exp[i(\alpha-is)x]=\pi\delta(\alpha)-i\mathscr{P}\frac{1}{\alpha}, \tag{21.83}$$

получим

$$G(\mathbf{k}\omega)=-\sum_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_n-E_n)]|\langle n|c_\mathbf{k}|m\rangle|^2\times \times\Big[i\pi\delta(\omega-\omega_{mn})(1-\exp[\beta(\mu-\omega_{mn})])+ +\mathscr{P}\frac{1}{\omega_{mn}-\omega}(1+\exp[\beta(\mu-\omega_{mn})])\Big]. \tag{21.84}$$

Разделив вещественную и мнимую части функции, находим

$$\operatorname{Re}\{G(\mathbf{k}\omega)\}= =-\sum_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_n-E_n)]|\langle n|c_\mathbf{k}|m\rangle|^2\mathscr{P}\frac{1+\exp[\beta(\mu-\omega_{mn})]}{\omega_{mn}-\omega}, \tag{21.85}$$

$$\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k}\omega)\}= =-\pi\sum_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_n-E_n)]|\langle n|c_\mathbf{k}|m\rangle|^2\delta(\omega-\omega_{mn})\times \times(1-\exp[\beta(\mu-\omega_{mn})]). \tag{21.86}$$

Заметив, что

$$\frac{1+\exp[\beta(\mu-\omega_{mn})]}{1-\exp[\beta(\mu-\omega_{mn})]}=\operatorname{cth}\frac{1}{2}\beta(\omega_{mn}-\mu), \tag{21.87}$$

составим выражение

$$\mathscr{P}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \operatorname{cth}\frac{1}{2}\beta(\omega'-\mu)\frac{\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k}\omega')\}}{\omega'-\omega}. \tag{21.88}$$

Согласно (21.86) оно равно

$$-\mathscr{P}\sum_{nm}\exp[\beta(\Omega+\mu N_n-E_n)](1+\exp[\beta(\mu-\omega_{mn})])\times \times|\langle n|c_{\mathbf{k}}|m\rangle|^2\frac{1}{\omega_{mn}-\omega}. \tag{21.89}$$

Итак, мы получили дисперсионное соотношение

$$\operatorname{Re}\{G(\mathbf{k}\omega)\}=\mathscr{P}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \operatorname{cth}\frac{1}{2}\beta(\omega'-\mu)\frac{\operatorname{Im}\{G(\mathbf{k}\omega')\}}{\omega'-\omega}, \tag{21.90}$$

которое в пределе $T\to 0$ согласуется с (21.57).

Уравнение движения. Точные уравнения движения, получаемые из (5.38), (5.42) и (5.43), имеют вид

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{p^2}{2m}\right)\Psi(\mathbf{x}t)=\int d^3y V(\mathbf{y}-\mathbf{x})\Psi^+(\mathbf{y}t)\Psi(\mathbf{y}t)\Psi(\mathbf{x}t), \tag{21.91}$$

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{p^2}{2m}\right)\Psi^+(\mathbf{x}t)=\Psi^+(\mathbf{x}t)\int d^3y V(\mathbf{y}-\mathbf{x})\Psi^+(\mathbf{x}t)\Psi^+(\mathbf{y}t)\Psi(\mathbf{y}t). \tag{21.92}$$

Исходя из этих уравнений, можно установить связь приближения Хартри — Фока с функциями Грина. Возьмем уравнение (21.91), воспользуемся двухчастичной функцией Грина K, определенной соотношением (21.12), и составим выражение

$$-i\left\langle T\left(i\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{(p')^2}{2m}\right)\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t)=\right.$$

$$=-i\int d^3y V(\mathbf{y}-\mathbf{x}')\langle T(\Psi^+(\mathbf{y}t')\Psi(\mathbf{y}t')\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t))\rangle=$$

$$=\int d^3\mathbf{y} V(\mathbf{y}-\mathbf{x}')K(\mathbf{y}t';\,\mathbf{x}'t';\,\mathbf{y}t'_+;\,\mathbf{x}t). \tag{21.93}$$

Здесь t'_+ на бесконечно малую величину больше t'; моменты времени t'_+ вводятся для того, чтобы обеспечить нужный порядок в последовательности сомножителей в T-произведениях.

Далее

$$\frac{\partial}{\partial t'}\langle T(\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t))\rangle-\left\langle T\left(\frac{\partial}{\partial t'}\Psi(\mathbf{x}'t')\Psi^+(\mathbf{x}t)\right)\right\rangle=$$

$$=\delta(t'-t)\delta(\mathbf{x}'-\mathbf{x}), \tag{21.94}$$

где мы воспользовались перестановочными соотношениями для операторов, относящихся к одному и тому же моменту времени. Теперь (21.93) мы можем переписать в следующем виде:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{(p')^2}{2m}\right)G(\mathbf{x}'t';\ \mathbf{x}t)=$$
$$=\delta(t-t')\,\delta(\mathbf{x}'-\mathbf{x})-i\int d^3yV(\mathbf{y}-\mathbf{x}')K(\mathbf{y}t';\ \mathbf{x}'t';\ \mathbf{y}t'_+;\ \mathbf{x}t). \quad (21.95)$$

Итак, мы получили точное уравнение, связывающее одночастичную функцию Грина с двухчастичной.

В приближении Хартри мы решаем уравнение (21.95), предположив, что две добавленные частицы, описываемые двухчастичной функцией Грина, распространяются в системе совершенно независимо друг от друга. Отсюда следует, что основное предположение приближения Хартри. сводится к выполнению приближенного равенства

$$K(1234)\approx G(13)\,G(24), \quad (21.96)$$

при условии, что спиновые индексы $s_1=s_3$ и $s_2=s_4$. Однако здесь не учитывается тождественность частиц. Принципиально невозможно различить процессы, в которых частица, добавленная в состояние 4, появляется в состоянии 2 от процессов, в которых она появляется в состоянии 1. Поэтому в приближении Хартри — Фока делают предположение о том, что для фермионов справедливо соотношение

$$K(1234)\approx G(13)\,G(24)-G(14)\,G(23). \quad (21.97)$$

В случае фермионов знаки в правой части (21.97) определяются соотношением $K(1234)=-K(2134)$.

Сверхпроводимость

Полезно изложить здесь трактовку теории сверхпроводимости БКШ, основанную на использовании функций Грина. (Это было сделано Горьковым [7]). Такая трактовка очень напоминает метод уравнений движения, изложенный в гл. 8.

Эффективный гамильтониан (8.31) можно переписать в виде

$$H=\int d^3x\Psi_\alpha^+(\mathbf{x}t)\frac{p^2}{2m}\Psi_\alpha(\mathbf{x}t)-$$
$$-\frac{1}{2}V\int d^3x\,d^3y\Psi_\alpha^+(\mathbf{x}t)\,\Psi_\beta^+(\mathbf{y}t)\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})\,\Psi_\beta(\mathbf{y}t)\,\Psi_\alpha(\mathbf{x}t). \quad (21.98)$$

Здесь α, β — спиновые индексы; в данном случае важно выписать их в явном виде, так как в этой записи подразумевается суммирование по повторяющимся индексам. Отметим, что не зависящее от $\mathbf{k}$ взаимодействие можно представить потенциалом в виде дельта-функции. Однако мы условимся считать потенциал V всюду равным нулю, за исключением энергетического слоя толщиной $2\omega_D$, середина которого соответствует поверхности Ферми; таким образом, потенциал V для взаимодействия типа притяжения будет *положительным*. Отметим, что в (21.98) член, содержащий V, автоматически исчезает в случае параллельных спинов ($\alpha=\beta$).

Одночастичная функция Грина определяется следующим образом:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t) = -i\langle T(\Psi_\alpha(\mathbf{x}t)\Psi_\beta^+(00))\rangle. \tag{21.99}$$

Обычным способом получим уравнения движения в виде

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{p^2}{2m}\right)\Psi_\alpha(x)+V\Psi_\beta^+(x)\Psi_\beta(x)\Psi_\alpha(x)=0, \tag{21.100}$$

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{p^2}{2m}\right)\Psi_\alpha^+(x)+V\Psi_\alpha^+(x)\Psi_\beta^+(x)\Psi_\beta(x)=0. \tag{21.101}$$

Здесь введено обозначение: $x\equiv\mathbf{x}t$. Действуя слева оператором $\Psi_\beta^+(x')$ и составляя тепловое среднее, получим

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{p^2}{2m}\right)G_{\alpha\beta}(x,\ x')-iV\langle T(\Psi_\gamma^+(x)\Psi_\gamma(x)\Psi_\alpha(x)\Psi_\beta^+(x'))\rangle = \\ =\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}. \tag{21.102}$$

Исходя, далее, из приближения Хартри — Фока, сделаем относительно двухчастичной функции Грина следующее предположение:

$$\langle T(\Psi_\alpha(x_1)\Psi_\beta(x_2)\Psi_\gamma^+(x_3)\Psi_\delta^+(x_4))\rangle = \\ =\langle T(\Psi_\alpha(x_1)\Psi_\delta^+(x_4))\rangle\langle T(\Psi_\beta(x_2)\Psi_\gamma^+(x_3))\rangle - \\ -\langle T(\Psi_\alpha(x_1)\Psi_\gamma^+(x_3))\rangle\langle T(\Psi_\beta(x_2)\Psi_\delta^+(x_4))\rangle. \tag{21.103}$$

Но основное состояние сверхпроводящей системы характеризуется наличием связанных пар электронов. Число таких пар является динамической переменной рассматриваемой задачи, и поэтому в правую часть (21.103) следует добавить член

$$\langle N|T(\Psi_\alpha(x_1)\Psi_\beta(x_2))|N+2\rangle\langle N+2|T(\Psi_\gamma^+(x_3)\Psi_\delta^+(x_4))|N\rangle. \tag{21.104}$$

Такое добавление к (21.103) вполне естественно. Состояния $|N\rangle$ и $|N+2\rangle$ соответствуют состояниям системы из N и из $N+2$ частиц. Если $|N\rangle$ — основное состояние, то $|N+2\rangle$ также является основным состоянием. Первый и второй множители в

(21.104) можно представить в виде

$$\langle N | T(\Psi_\alpha(x)\Psi_\beta(x'))|N+2\rangle = e^{-2i\mu t}F_{\alpha\beta}(x-x'), \qquad (21.105)$$

$$\langle N+2 | T(\Psi_\alpha^+(x)\Psi_\beta^+(x'))|N\rangle = e^{2i\mu t}F_{\alpha\beta}^+(x-x'). \qquad (21.106)$$

Мы предполагаем, что имеет место инвариантность по отношению к преобразованиям Галилея. Введенная в (21.105) и (21.106) величина μ представляет собой химический потенциал и фигурирует в рассматриваемой задаче, поскольку для произвольного оператора $O(t)$ справедливо приближенное соотношение

$$i\frac{\partial}{\partial t}\langle N|O(t)|N+2\rangle = \langle N|[O, H]|N+2\rangle =$$
$$= (E_{N+2}-E_N)\langle N|O(t)|N+2\rangle \approx 2\mu\langle N|O(t)|N+2\rangle, \qquad (21.107)$$

в котором использовано определение $\mu = \partial E/\partial N$.

Из уравнения движения (21.102) и из определения функций G и F можно непосредственно получить

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{p^2}{2m}\right)G_{\alpha\beta}(x-x') - iVF_{\alpha\gamma}(+0)F_{\gamma\beta}^+(x-x') = \delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}. \qquad (21.108)$$

Это следует из того, что при использовании (21.104) и пренебрежении обычными хартри-фоковскими членами, которые можно включить в μ, получим в (21.102) для $\langle T(\ldots)\rangle$ соотношение

$$\langle T(\Psi_\gamma^+(x)\Psi_\gamma(x)\Psi_\alpha(x)\Psi_\beta^+(x'))\rangle \approx$$
$$\approx -\langle\Psi_\alpha(x)\Psi_\gamma(x)\rangle\langle T(\Psi_\gamma^+(x)\Psi_\beta^+(x'))\rangle =$$
$$= -F_{\alpha\gamma}(+0)F_{\gamma\alpha}^+(x-x'); \qquad (21.109)$$

здесь

$$F_{\alpha\gamma}(+0) \equiv \lim_{\substack{\mathbf{x}\to\mathbf{x}' \\ t\to t'+0}} F_{\alpha\gamma}(x-x') = e^{2i\mu t}\langle\Psi_\alpha(x)\Psi_\gamma(x)\rangle. \qquad (21.110)$$

Подставляя (21.109) в (21.102), получим (21.108). Заметим, что $F_{\alpha\gamma}(+0) = -F_{\gamma\alpha}(+0)$, поскольку при спаривании спинов $\alpha \neq \gamma$. Можно записать матрицу

$$\hat{F}(+0) = J\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = J\hat{A}, \qquad (21.111)$$

где J — c-число; кроме того, из (21.106) следует, что

$$\left(F_{\alpha\beta}^+(\mathbf{x}-\mathbf{x}', 0)\right)^* = -F_{\alpha\beta}(\mathbf{x}-\mathbf{x}', 0), \qquad (21.112)$$

и поэтому можно написать

$$\hat{F}^+(x-x') = \hat{A}F^+(x-x'); \quad \hat{F} = -\hat{A}F(x-x');$$
$$\left(F^+(\mathbf{x}-\mathbf{x}', 0)\right)^* = -F(\mathbf{x}-\mathbf{x}', 0). \qquad (21.113)$$

Мы считаем $\hat{A}^2 = -\hat{I}$, где $\hat{I}$ — единичная матрица.

Уравнение (21.108) можно переписать в матричной форме

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{p^2}{2m}\right)\hat{G}(x-x') - iV\hat{F}(+0)\hat{F}^+(x-x') = \delta(x-x')\hat{I}. \quad (21.114)$$

Однако легко убедиться в том, что недиагональные компоненты $\hat{G}$ равны нулю; тогда, учитывая, что

$$\hat{G}_{\alpha\beta}(x-x') \equiv \delta_{\alpha\beta}G(x-x'), \qquad (21.115)$$

находим

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{p^2}{2m}\right)G(x-x') + iVF(+0)F^+(x-x') = \delta(x-x'). \quad (21.116)$$

Действуя справа оператором Ψ_β^+, получим уравнение

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{p^2}{2m} + 2\mu\right)\hat{F}^+(x-x') + iV\hat{F}^+(+0)\hat{G}(x-x') = 0, \quad (21.117)$$

которое приводится к виду

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{p^2}{2m} + 2\mu\right)F^+(x-x') + iVF^+(+0)G(x-x') = 0. \quad (21.118)$$

Проанализируем уравнения (21.116) и (21.118), используя фурье-компоненты $G(\mathbf{k}\omega)$ и $F^+(\mathbf{k}\omega)$; имеем

$$\left(\omega - \frac{k^2}{2m}\right)G(\mathbf{k}\omega) + iVF(+0)F^+(\mathbf{k}\omega) = 1, \qquad (21.119)$$

$$\left(\omega + \frac{k^2}{2m} - 2\mu\right)F^+(\mathbf{k}\omega) - iVF^+(+0)G(\mathbf{k}\omega) = 0. \quad (21.120)$$

Введем обозначения $\omega' = \omega - \mu$, $\varepsilon_\mathbf{k} = (k^2/2m) - \mu$; $\Delta^2 = V^2F(+0)F^+(+0)$. Тогда решения уравнений (21.119) и (21.120) запишутся в виде

$$G(\mathbf{k}\omega) = \frac{\omega' + \varepsilon_\mathbf{k}}{\omega'^2 - \lambda_\mathbf{k}^2}; \quad F^+(\mathbf{k}\omega) = i\frac{VF^+(+0)}{\omega'^2 - \lambda_\mathbf{k}^2}, \qquad (21.121)$$

где

$$\lambda_\mathbf{k}^2 = \varepsilon_\mathbf{k}^2 + \Delta^2 \qquad (21.122)$$

является энергией квазичастицы (8.78).

Решение (21.121) для $F^+(\mathbf{k}\omega)$ должно быть согласовано с величиной $F^+(+0)$. Для изучения этого вопроса рассмотрим величину

$$F^+(x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k\, d\omega \exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t)]\, F^+(\mathbf{k}\omega), \quad (21.123)$$

или для $\mathbf{x}=0$ — величину

$$F^+(0t) = \frac{iVF^+(+0)}{(2\pi)^4} \int d^3k\, d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega'^2 - \lambda_\mathbf{k}^2}. \quad (21.124)$$

Вычислим интеграл по $d\omega$ для $t \to +0$:

$$\lim_{s\to+0} \frac{1}{2\lambda_\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}\left(\frac{1}{\omega' - \lambda_\mathbf{k} + is} - \frac{1}{\omega' + \lambda_\mathbf{k} - is}\right) = -\frac{i\pi}{\lambda_\mathbf{k}}, \quad (21.125)$$

где мы заменили $\lambda_\mathbf{k}$ на $\lim\limits_{s\to+0}(\lambda_\mathbf{k} - is)$, чтобы учесть эффект столкновений. Итак,

$$F^+(+0) = \frac{VF^+(+0)}{2(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{\lambda_\mathbf{k}} = \frac{1}{2} VF^+(+0) \sum_\mathbf{k} \frac{1}{(\varepsilon_\mathbf{k}^2 + \Delta^2)^{1/2}}, \quad (21.126)$$

или

$$1 = \frac{1}{2} V \sum_\mathbf{k} \frac{1}{(\varepsilon_\mathbf{k}^2 + \Delta^2)^{1/2}}. \quad (21.127)$$

Это и есть основное уравнение теории Бардина — Купера — Шриффера (8.53), приведенное выше в гл. 8.

Пользуясь (21.121), можно представить $G(\mathbf{k}\omega)$ в виде

$$G(\mathbf{k}\omega) = \frac{u_\mathbf{k}^2}{\omega' - \lambda_\mathbf{k} + is} + \frac{v_\mathbf{k}^2}{\omega' + \lambda_\mathbf{k} - is}, \quad (21.128)$$

где, так же как и в (8.93) и (8.94),

$$u_\mathbf{k}^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon_\mathbf{k}}{\lambda_\mathbf{k}}\right), \qquad v_\mathbf{k}^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon_\mathbf{k}}{\lambda_\mathbf{k}}\right). \quad (21.129)$$

Заметим, что в уравнении

$$(\omega'^2 - \lambda_\mathbf{k}^2) F^+(\mathbf{k}\omega) = iVF^+(+0), \quad (21.130)$$

из которого определяется второе из решений (21.121), можно к $F^+(\mathbf{k}\omega)$ добавить член вида

$$B(\mathbf{k})\,\delta(\omega'^2 - \lambda_\mathbf{k}^2),$$

где $B(\mathbf{k})$ — произвольная функция $\mathbf{k}$. Такая операция эквивалентна добавлению произвольной мнимой части к $G(\mathbf{k}\omega)$;

эта часть определена в работе Горькова [7] при помощи дисперсионного соотношения.

Теория возмущений в методе функций Грина. На этом этапе усвоение теории вызывает трудности у студентов, незнакомых с методами расчетов, применяемыми в квантовой теории поля. Мы ограничимся здесь лишь краткой сводкой основных результатов, относящихся к фермионным системам. Положим $H = H_0 + V$ и выберем H_0 так, чтобы одночастичную функцию Грина, соответствующую H_0, можно было найти в явном виде.

Если потенциал V имеет вид билинейной формы по операторам фермионов Ψ, Ψ^+, то унитарный оператор $U(t, t')$, определенный в гл. 1 выражением (1.56), можно представить в виде

$$U(t, t') = \sum_n \frac{(-1)^n}{n!} \int_{t'}^{t} \ldots \int_{t'}^{t} dt_1 \ldots dt_n T\{V(t_1) V(t_2) \ldots V(t_n)\}, \tag{21.131}$$

где T — хронологический оператор Вика.

Обычным путем введем S-матрицу, определенную соотношением

$$S \equiv U(\infty, -\infty). \tag{21.132}$$

Обозначим через Φ_0 волновую функцию основного состояния системы, описываемой гамильтонианом H_0 (в гл. 1 мы обозначали эту функцию через $|0\rangle$). Введем еще предположение об адиабатическом включении взаимодействия, согласно которому $S\Phi_0$ может отличаться от Φ_0 только фазовым множителем. Потенциал $V(t)$ в (21.131) берется в представлении взаимодействия.

Первый результат, который мы здесь не будем выводить, состоит в том, что точная одночастичная функция Грина определяется выражением

$$G(\mathbf{k}t) = -i \frac{\langle \Phi_0 | T(c_{\mathbf{k}}(t) c_{\mathbf{k}}^+(0) S) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S | \Phi_0 \rangle}, \tag{21.133}$$

где все величины берутся в представлении взаимодействия. Полезно объединить (21.131) с (21.133); тогда получим

$$G(\mathbf{k}t) = -\frac{i}{\langle \Phi_0 | S | \Phi_0 \rangle} \sum_n^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \ldots dt_n \times$$
$$\times \langle \Phi_0 | T(c_{\mathbf{k}}(t) c_{\mathbf{k}}^+(0) V(t_1) \ldots V(t_n)) | \Phi_0 \rangle. \tag{21.134}$$

Вычисление члена n-го порядка в разложении функции G в ряд по теории возмущений обычно производится с помощью теоремы Вика, которая позволяет определять средние от произведений полевых операторов, сводя их к произведениям средних от парных произведений, содержащих один оператор c и один оператор c^+. Подробное обсуждение этого вопроса имеется в книге Абрикосова и др. [1].

ЗАДАЧИ

21.1. Найти выражение для функции Грина $G(\mathbf{x}t)$ одномерного ферми-газа в основном состоянии, считая, что все одноэлектронные состояния вплоть до k_F заполнены, а для $k>k_F$ — свободны. Рассмотреть как случай $t>0$, так и случай $t<0$. Результат можно выразить через интегралы Френеля.

21.2. Показать, что плотность тока частиц в отсутствие магнитного поля (принимая во внимание обе возможные ориентации спина) можно выразить следующей формулой:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}t) = -\frac{1}{m} \lim_{\substack{\mathbf{x}\to\mathbf{x}' \\ t\to t'+0}} (\mathrm{grad}_{\mathbf{x}'} - \mathrm{grad}_{\mathbf{x}})\, G(\mathbf{x}'t';\ \mathbf{x}t). \tag{21.135}$$

Заметим, что выражение для плотности частиц имеет вид

$$n(\mathbf{x}t) = -i \lim_{\substack{\mathbf{x}\to\mathbf{x}' \\ t\to t'+0}} 2G(\mathbf{x}'t';\ \mathbf{x}t). \tag{21.136}$$

Литература

1. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, 1962.
2. Каданов Л., Бейм Дж., Квантовая статистическая механика, ИЛ, 1964.
3. Nozières P., Le problème à N corps, Dunod, P., 1963.
4. Пайнс Д., Проблема многих тел, ИЛ, 1963.
5. Беляев С. Т., ЖЭТФ **34**, 417, 433 (1958).
6. Галицкий В. М., Мигдал А. Б., ЖЭТФ **34**, 139 (1958).
7. Горьков Л. П., ЖЭТФ **34**, 735 (1958).
8. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В., Метод функций Грина в статистической механике, Физматгиз, 1961.
9. Зубарев Д. Н., УФН **71**, 71 (1960).