

## § 7. Функция Грина макроскопической системы

Примененный в предыдущем параграфе метод становится громоздким и практически неприменимым в высших приближениях теории возмущений. Этот недостаток тем более существен, что в реальных физических задачах взаимодействие между частицами отнюдь не является слабым, так что для выяснения различных общих свойств макроскопических систем требуется рассмотрение бесконечных совокупностей членов ряда теории возмущений. Для преодоления подобных трудностей существует математическая техника, подобная той, которая применяется в квантовой теории поля.

Конкретная форма этого математического аппарата существенно зависит от характера макроскопической системы, к которой она должна применяться. Последующие параграфы этой главы посвящены развитию аппарата для ферми-жидкости при абсолютном нуле температур<sup>1)</sup>. При этом изложение имеет своей целью не только фактическое применение метода к данному объекту, но и демонстрацию того, каким образом вообще строится такой аппарат.

Исходным материалом в нем являются вторично-квантованные  $\psi$ -операторы, свойства которых известны из квантовой механики (см. III §§ 64, 65). Нам сейчас понадобятся эти операторы в гейзенберговском представлении, в котором они зависят явно от времени. Поэтому мы начнем с выяснения некоторых свойств  $\psi$ -операторов в этом представлении.

Мы будем рассматривать системы, составленные из частиц со спином  $1/2$ . Соответственно этому,  $\psi$ -операторам должен быть присвоен индекс, указывающий значение проекции спина и пробегающий значения  $\pm 1/2$ ; спиновые индексы будем по-прежнему обозначать буквами греческого алфавита, а по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

По общему правилу (см. III § 13) оператор  $\hat{f}(t)$  любой физической величины в гейзенберговском представлении выражается через не зависящий от времени (шредингеровский) оператор  $\hat{f}$

<sup>1)</sup> Систематическое построение этого аппарата принадлежит В. М. Галицкому и А. Б. Мигдалу (1958).

той же величины согласно<sup>1)</sup>

$$\hat{f}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{f} e^{-i\hat{H}t},$$

где  $\hat{H}$  — гамильтониан системы.

Здесь, однако, будет целесообразно несколько изменить это определение. Дело в том, что в квантовой статистике удобнее рассматривать состояния системы не при заданном числе частиц  $N$  в ней, а при заданном химическом потенциале  $\mu$ . При этом основное состояние системы, в котором она находится при  $T=0$ , можно определить как состояние с наименьшим собственным значением оператора

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad (7,1)$$

(а не  $\hat{H}$ , как при заданном  $N$ ). Действительно, вероятность системе находиться (при заданном значении  $\mu$ ) в состоянии с энергией  $E_n$  и числом частиц  $N_n$ :

$$\omega \propto \exp\left(-\frac{E_n - \mu N_n}{T}\right) = \exp\left(-\frac{E'_n}{T}\right)$$

(см. V (35,1));  $E'_n$  — собственные значения оператора  $\hat{H}'$ , и мы видим, что при  $T=0$  остается только состояние с наименьшим  $E'_n$ <sup>2)</sup>.

Таким образом, определим гейзенберговские  $\psi$ -операторы формулами

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) &= e^{i\hat{H}'t} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}'t}, \\ \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(t, \mathbf{r}) &= e^{i\hat{H}'t} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}'t}. \end{aligned} \quad (7,2)$$

Мы будем обозначать гейзенберговские  $\psi$ -операторы заглавной буквой  $\hat{\Psi}$ , а шредингеровские — строчной буквой  $\hat{\psi}$ .

Шредингеровские  $\psi$ -операторы удовлетворяют известным правилам коммутации. Коммутаторы же гейзенберговских операторов, взятых в различные моменты времени  $t$  и  $t'$ , нельзя вычислить в общем виде. Однако при  $t=t'$  их правила коммутации совпадают с правилами для шредингеровских операторов. Так, из правила

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}') + \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

<sup>1)</sup> С целью упрощения записи формул мы будем широко пользоваться системой единиц, в которой квантовая постоянная  $\hbar = 1$  (так что импульс имеет размерность см<sup>-1</sup>, а энергия сек<sup>-1</sup>). Для перехода от этой системы к обычным единицам все импульсы  $\mathbf{p}$  и энергии  $E$  в формулах надо заменить на  $\mathbf{p}/\hbar$  и  $E/\hbar$ . Такие единицы используются, в частности, в этой главе.

<sup>2)</sup> Мы будем называть оператор  $\hat{H}'$ , как и  $\hat{H}$ , гамильтонианом.

следует аналогичное правило

$$\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = e^{i\hat{H}t} (\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r})) e^{-i\hat{H}t} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7,3)$$

Таким же образом:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) &= 0, \\ \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) &= 0. \end{aligned} \quad (7,4)$$

Дифференцируя определение (7,2) по времени, найдем, что гейзенберговский  $\psi$ -оператор удовлетворяет уравнению

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = \hat{H}' \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) - \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \hat{H}' \quad (7,5)$$

(ср. III (13,7)).

Гейзенберговское и шредингеровское представления тождественны для оператора всякой сохраняющейся величины (т. е. оператора, коммутативного с гамильтонианом). Это относится, в частности, к самому гамильтониану, а также к оператору числа частиц — тоже, разумеется, сохраняющейся величины. Выражения этих операторов через шредингеровские или гейзенберговские  $\psi$ -операторы одинаковы. Так, оператор числа частиц

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) d^3x = \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x. \quad (7,6)$$

Гамильтониан же системы взаимодействующих частиц имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{H}'^{(0)} + \hat{V}^{(1)} + \hat{V}^{(2)} + \dots \\ \hat{H}'^{(0)} &= -\frac{1}{2m} \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \Delta \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x - \mu \hat{N}, \\ \hat{V}^{(1)} &= \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) U^{(1)}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x, \\ \hat{V}^{(2)} &= \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}) d^3x d^3x'. \end{aligned} \quad (7,7)$$

Здесь  $\hat{H}'^{(0)}$  — гамильтониан системы свободных частиц;  $\hat{V}^{(1)}$  — оператор их взаимодействия с внешним полем  $U^{(1)}(\mathbf{r})$ ;  $\hat{V}^{(2)}$  — оператор парного взаимодействия частиц, причем  $U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  — энергия взаимодействия двух частиц; опущенные члены — тройные и т. д. взаимодействия (ср. III (64,25)). Для простоты предполагаем все взаимодействия не зависящими от спинов частиц.

Коммутатор  $\hat{H}'$  и  $\hat{\Psi}_\alpha$  в (7,5) вычисляется с помощью правил (7,3—4); возникающие при этом  $\delta$ -функции устраняются интегрированием. В результате получим «уравнение Шредингера» для

$\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r})$  в виде

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = \left( -\frac{1}{2m} \Delta - \mu + U^{(1)}(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) + \int \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') d^3x' \cdot \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) + \dots \quad (7,8)$$

Основную роль в излагаемом методе играет понятие *функции Грина* макроскопической системы. Она определяется следующим выражением<sup>1)</sup>:

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -i \langle T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \rangle. \quad (7,9)$$

Здесь и ниже  $X$  обозначает, для краткости, совокупность момента времени  $t$  и радиус-вектора точки  $\mathbf{r}$ . Угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по основному состоянию системы (вместо более громоздкого символа диагонального матричного элемента  $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$ ). Символ же  $T$  есть знак хронологического произведения: следующие за ним операторы должны быть расположены справа налево в порядке возрастания времен  $t_1, t_2$ . При этом в случае фермионов перестановка пары  $\psi$ -операторов (по сравнению с их расположением в первоначальной записи произведения) должна сопровождаться изменением знака произведения. В явном виде это значит, что

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \begin{cases} -i \langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \rangle, & t_1 > t_2, \\ i \langle \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (7,10)$$

Отметим некоторые очевидные свойства функции Грина. Если система не ферромагнитна и не находится во внешнем поле, то спиновая зависимость функции Грина сводится к единичной матрице:

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta} G(X_1, X_2) \quad (7,11)$$

(всякая другая форма зависимости выделяла бы избранное направление в пространстве — ось  $z$  квантования спина)<sup>2)</sup>. В силу однородности времени моменты  $t_1$  и  $t_2$  входят в функцию Грина лишь в виде разности  $t = t_1 - t_2$ . Если, сверх того, система макроскопически однородна в пространстве, то лишь в виде разности

<sup>1)</sup> Это определение аналогично определению точных функций Грина (пропагаторов) в квантовой электродинамике (ср. IV §§ 100, 102).

<sup>2)</sup> Это утверждение требует пояснения. Спиновые компоненты  $\hat{\Psi}_\alpha$  составляют контравариантный спинор первого ранга (и в этом смысле более правильным было бы обозначение  $\hat{\Psi}^\alpha$  с индексом  $\alpha$  сверху). Компоненты же  $\hat{\Psi}_\beta^+$  составляют ковариантный спинор. Поэтому  $G_{\alpha\beta}$  есть смешанный спинор второго ранга. Единичным же смешанным спинором второго ранга является именно  $\delta_{\alpha\beta}$ .

$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  входят также и координаты двух точек. Другими словами, в этом случае

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta}G(X), \quad X = X_1 - X_2. \quad (7,12)$$

Подчеркнем, что микроскопическая однородность означает, что тело предполагается однородным не только по своей средней (макроскопической) плотности, но и по плотности вероятности различных (микроскопических) положений ее частиц в пространстве. Именно таковы жидкости и газы (но не твердые кристаллы). В силу их изотропии  $G(t, \mathbf{r}) = G(t, -\mathbf{r})$ . В этой связи подчеркнем лишний раз, что в то же время функция  $G(t, \mathbf{r})$ , по самому своему определению, отнюдь не четна по переменной  $t$ . В этом смысле порядок  $t_1$  и  $t_2$  в разности  $t = t_1 - t_2$  существен.

Координатная матрица плотности частицы в системе определяется как среднее значение

$$\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{N} \langle \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}_1) \rangle. \quad (7,13)$$

Знание этой матрицы позволяет определить среднее значение любой величины, относящейся к отдельной частице. Действительно, пусть  $\hat{F}_{\alpha\beta}$  — некоторый «одночастичный» оператор, т. е. оператор вида

$$\hat{F}_{\alpha\beta} = \sum_a \hat{f}_{\alpha\beta}^{(a)}, \quad (7,14)$$

где  $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(a)}$  — оператор, действующий на координаты и спин лишь одной ( $a$ -й) частицы, а суммирование производится по всем частицам в системе. В аппарате вторичного квантования такой оператор записывается (в гейзенберговском представлении) как

$$\hat{F}_{\alpha\beta}(t) = \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \hat{f}_{\beta\gamma} \hat{\Psi}_\gamma(t, \mathbf{r}) d^3x \quad (7,15)$$

(ср. III (64,23)). Отсюда ясно, что среднее значение величины  $F$  может быть выражено в терминах матрицы плотности в виде

$$\langle F \rangle = N \langle f \rangle = N \int [\hat{f}_{\alpha\beta}^{(1)} \rho_{\beta\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]_{\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1} d^3x_1, \quad (7,16)$$

где  $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(1)}$  — оператор, действующий на координаты  $\mathbf{r}_1$  (положить  $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$  надо после воздействия оператора, но перед интегрированием).

Согласно (7,10), матрица плотности может быть выражена через гриновскую функцию

$$\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{i}{N} G_{\alpha\beta}(t_1, \mathbf{r}_1; t_1 + 0, \mathbf{r}_2). \quad (7,17)$$

Здесь (как и везде ниже) обозначение аргумента функции в виде  $t_1 + 0$  означает, что имеется в виду предел при стремлении аргумента к значению  $t_1$  сверху. Взятием этого предела обеспечивается правильная расстановка  $\Psi$ -операторов, совпадающая с их расстановкой в произведении (7,13).

Для микроскопически однородной системы матрица плотности зависит только от разности  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , а при независимости от спинов  $\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}\rho$ , причем

$$\rho(\mathbf{r}) = -\frac{i}{N} G(t = -0, \mathbf{r}), \quad (7,18)$$

где вместо  $G_{\alpha\beta}(X_1, X_2)$  введена функция  $G(X_1 - X_2) \equiv G(X)$  согласно (7,12). При  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$  и после взятия следа по спиновым переменным произведение операторов в (7,13) превращается в  $\hat{\Psi}_\alpha^\dagger \hat{\Psi}_\alpha$  — оператор плотности числа частиц в системе. Поэтому средняя плотность тела

$$\frac{N}{V} = 2N\rho(0) = -2iG(t = -0, \mathbf{r} = 0) \quad (7,19)$$

( $t$  стремится к нулю снизу). Это равенство связывает химический потенциал  $\mu$  при  $T=0$  (от которого  $G$  зависит как от параметра) с плотностью числа частиц  $N/V$ .

Фурье-разложение функций  $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  определяет распределение частиц по импульсам<sup>1)</sup>

$$\begin{aligned} N(\mathbf{p}) &= N \int \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} d^3(x_1 - x_2) = \\ &= -i \int G(t, \mathbf{r}) \Big|_{t=-0} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3x. \end{aligned} \quad (7,20)$$

Это есть число частиц (в единице объема) с определенным значением проекции спина и с импульсами в интервале  $d^3p/(2\pi)^3$ . Подчеркнем, что речь идет здесь об истинных частицах, а не о квазичастицах (последние в излагаемом аппарате еще не появились!). Обозначение  $N(\mathbf{p})$  введено в отличие от функции распределения квазичастиц  $n(\mathbf{p})$ .

<sup>1)</sup> Напомним (см. III § 14), что одночастичная матрица плотности есть интеграл

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int \Psi^*(\mathbf{r}_2, q) \Psi(\mathbf{r}_1, q) dq,$$

где  $\Psi(\mathbf{r}, q)$  — волновая функция системы в целом, причем  $\mathbf{r}$  обозначает радиус-вектор одной частицы, а  $q$  — совокупность координат всех остальных частиц: по последним производится интегрирование. Фурье-компоненты матрицы плотности совпадают с выражением

$$\int \left| \int \Psi(\mathbf{r}, q) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3x \right|^2 dq,$$

откуда и следует ее связь с распределением частиц по импульсам.

В дальнейшем мы будем обычно иметь дело с функцией Грина в импульсном представлении, определенной как компонента фурье-разложения функции  $G(t, \mathbf{r})$  по  $t$  и  $\mathbf{r}$ :

$$G(t, \mathbf{r}) = \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \omega t)} \frac{d\omega d^3p}{(2\pi)^4}, \quad (7,21)$$

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \int G(t, \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \omega t)} dt d^3x. \quad (7,22)$$

Распределение частиц по импульсам выражается через эту функцию формулой

$$N(\mathbf{p}) = -i \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (7,23)$$

получающейся подстановкой (7,21) в (7,20). Ее нормировка выражается формулой

$$-2i \lim_{t \rightarrow -0} \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega d^3p}{(2\pi)^4} = \frac{N}{V}, \quad (7,24)$$

представляющей собой условие (7,19), выраженное в импульсном представлении. Таким образом, распределение  $N(\mathbf{p})$  автоматически правильно нормировано:

$$2 \int N(\mathbf{p}) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{N}{V}.$$

Отметим, что предел, в котором берутся интегралы (7,23—24), эквивалентен определенному правилу обхода в плоскости комплексной переменной  $\omega$ . Наличие множителя  $e^{-i\omega t}$  с  $t < 0$  позволяет замкнуть путь интегрирования (вещественная ось) бесконечно удаленной полуокружностью в верхней полуплоскости  $\omega$ , так что интеграл определяется вычетами функции  $G(\omega, \mathbf{p})$  в ее полюсах, лежащих в этой полуплоскости.

## § 8. Определение энергетического спектра по функции Грина

Для микроскопически однородной системы легко определить зависимость от времени и координат матричных элементов гейзенберговского  $\psi$ -оператора по отношению к стационарным состояниям с определенными значениями энергии и импульса.

Зависимость от времени дается обычным экспоненциальным множителем

$$\langle n | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | m \rangle = e^{i\omega_{nm}t} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) | m \rangle, \quad (8,1)$$

но поскольку гейзенберговский  $\psi$ -оператор определен с помощью гамильтониана  $\hat{H}'$ , то

$$\omega_{nm} = E'_n - E'_m = E_n - E_m - \mu(N_n - N_m).$$