

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 ω . Наличие множителя $e^{-i\omega t}$ с $t < 0$ позволяет замкнуть путь интегрирования (вещественная ось) бесконечно удаленной полуокружностью в верхней полуплоскости ω , 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 ψ -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 ψ -оператор определен с помощью гамильтониана \hat{H}' , то

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

Согласно общим свойствам ψ -операторов, оператор $\hat{\Psi}$ уменьшает (а $\hat{\Psi}^+$ увеличивает) число частиц в системе на 1. Поэтому в матричном элементе (8,1) $N_n = N_m - 1$, так что

$$\omega_{nm} = E_n(N) - E_m(N+1) + \mu, \quad (8,2)$$

где в виде аргументов указаны числа частиц в соответствующих состояниях.

Для определения координатной зависимости замечаем, что в силу однородности системы матричные элементы ее ψ -операторов не могут измениться при смещении на любое расстояние \mathbf{r} относительно системы. Это, однако, не означает, что матричные элементы вообще не зависят от координат. Дело в том, что отличие $\psi_{nm}(\mathbf{r})$ от значения $\psi_{nm}(0)$ в некоторой заданной точке $\mathbf{r}=0$ связано с двумя причинами: со смещением на расстояние \mathbf{r} относительно самой системы и с перемещением точки наблюдения в другое место пространства, что также меняет фазы волновых функций. Чтобы исключить последнее изменение, сместим систему на вектор $-\mathbf{r}$, т. е. применим к ее волновым функциям оператор параллельного переноса

$$\hat{T}(-\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r}\hat{\mathbf{P}}}$$

($\hat{\mathbf{P}}$ —оператор полного импульса системы; см. III (15,13)). В результате этих операций точка наблюдения вернется в исходное место пространства, но останется смещенной относительно системы на вектор \mathbf{r} . Инвариантность матричных элементов по отношению к такому преобразованию выразится равенством

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle = \langle n | e^{i\mathbf{r}\hat{\mathbf{P}}} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}\hat{\mathbf{P}}} | m \rangle. \quad (8,3)$$

Если в состояниях n и m система обладает определенными импульсами \mathbf{P}_n и \mathbf{P}_m , то

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle = e^{i\mathbf{k}_{nm}\mathbf{r}} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) | m \rangle,$$

откуда

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | m \rangle &= e^{i(\omega_{nm}t - \mathbf{k}_{nm}\mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle, \\ \langle n | \Psi_\alpha^+(t, \mathbf{r}) | m \rangle &= \langle m | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | n \rangle^*, \end{aligned} \quad (8,4)$$

где $\mathbf{k}_{nm} = \mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m$.

С помощью этих формул можно получить важное разложение для функции Грина в импульсном пространстве, проясняющее ее физический смысл.

Ввиду «разрывного» определения функции $G(t, \mathbf{r})$, при вычислении $G(\omega, \mathbf{p})$ надо разбить интеграл по dt в (7,22) на два интеграла: от $-\infty$ до 0 и от 0 до ∞ . Во втором из них (т. е. при $t = t_1 - t_2 > 0$) имеем, раскрывая определение (7,10) по

правилу умножения матриц:

$$G(t, \mathbf{r}) = \frac{i}{2} G_{\alpha\alpha} = -\frac{i}{2} \sum_m \langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(X_1) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(X_2) | 0 \rangle$$

(суммирование по всем квантовым состояниям системы). Подставив сюда (8,4) и заметив, что в основном состоянии $\mathbf{P}_0 = 0$, находим

$$G(t, \mathbf{r}) = -\frac{i}{2} \sum_m |\langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 e^{i(\omega_{0m}t + \mathbf{P}_m \mathbf{r})}, \quad (8,5)$$

где $\omega_{0m} = E_0(N) - E_m(N+1) + \mu$.

Интегрирование по пространству в (7,22) (с $G(t, \mathbf{r})$ из (8,5)) дает в каждом члене суммы δ -функцию $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)$. При интегрировании же по dt ($t > 0$) для обеспечения сходимости надо добавить к ω бесконечно малую положительную мнимую часть, т. е. заменить $\omega \rightarrow \omega + i0^1$. Тогда получим

$$\int_0^\infty \int G(t, \mathbf{r}) e^{i(\omega t - \mathbf{p}\mathbf{r})} d^3x dt = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_m |\langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 \frac{\delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \omega_{0m} + i0}.$$

Аналогичным образом вычисляется интеграл по dt от $-\infty$ до 0. При $t < 0$ вместо (8,5) имеем

$$G(t, \mathbf{r}) = \frac{i}{2} \sum_m |\langle m | \hat{\Psi}_\alpha(0) | 0 \rangle|^2 e^{i(\omega_{m0}t - \mathbf{P}_m \mathbf{r})}, \quad (8,6)$$

где $\omega_{m0} = E_m(N-1) - E_0(N) + \mu$. Вычислив теперь интеграл от $-\infty$ до 0 и сложив оба интеграла, получим

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\omega, \mathbf{p}) = & \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu + E_0(N) - E_m(N+1) + i0} + \right. \\ & \left. + \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu + E_m(N-1) - E_0(N) - i0} \right\}, \end{aligned} \quad (8,7)$$

где обозначено

$$A_m = |\langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2, \quad B_m = |\langle m | \hat{\Psi}_\alpha(0) | 0 \rangle|^2. \quad (8,8)$$

Это и есть искомое разложение²⁾.

Введем обозначения

$$\epsilon_m^{(+)} = E_m(N+1) - E_0(N), \quad \epsilon_m^{(-)} = E_0(N) - E_m(N-1) \quad (8,9)$$

¹⁾ Эта процедура аналогична способу вычисления функций Грина в квантовой электродинамике (ср. IV § 76).

²⁾ Аналогичное разложение в квантовой теории поля называют формулой Челлена—Лемана (ср. IV §§ 101, 108).

для энергий возбуждения, определенных по разностям между возбужденным уровнем системы с определенным числом частиц и основным уровнем системы, содержащей на одну частицу больше или меньше. Индексы (+) и (-) указывают, что эти энергии

$$\varepsilon_m^{(+)} > \mu, \quad \varepsilon_m^{(-)} < \mu. \quad (8,10)$$

Действительно, заметив, что $E_0(N+1) - E_0(N) \approx \partial E_0 / \partial N = \mu$ — химический потенциал при $T=0$, пишем, например,

$$\begin{aligned} \varepsilon_m^{(+)} = E_m(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N) &\approx \\ &\approx [E_m(N+1) - E_0(N+1)] + \mu. \end{aligned}$$

Но разность в квадратных скобках (где обе энергии относятся к системам с одинаковым числом частиц) положительна по определению основного состояния, откуда и следует, что $\varepsilon_m^{(+)} > \mu$. К смыслу определения (8,9) мы еще вернемся ниже.

Сдвиг полюсов членов суммы (как функций ω), выражаемый слагаемыми $\pm i0$ в их знаменателях, эквивалентен появлению δ -функционных мнимых частей согласно правилу¹⁾

$$\frac{1}{x \pm i0} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x). \quad (8,11)$$

Применив его к (8,7), найдем вещественную часть гриновской функции

$$\operatorname{Re} G(\omega, \mathbf{p}) = 4\pi^3 \sum_m P \left[\frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu - \varepsilon_m^{(+)}} + \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu - \varepsilon_m^{(-)}} \right] \quad (8,12)$$

и ее мнимую часть (здесь надо учесть, что все разности $\varepsilon_m^{(+)} - \mu > 0$, а все разности $\varepsilon_m^{(-)} - \mu < 0$):

$$\operatorname{Im} G(\omega, \mathbf{p}) = \begin{cases} -4\pi^4 \sum_m A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^{(+)}) & \text{при } \omega > 0, \\ 4\pi^4 \sum_m B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^{(-)}) & \text{при } \omega < 0. \end{cases} \quad (8,13)$$

Отсюда видно, что всегда

$$\operatorname{sign} \operatorname{Im} G(\omega, \mathbf{p}) = -\operatorname{sign} \omega. \quad (8,14)$$

¹⁾ Ср. III (43,10). Знак P означает, что при интегрировании выражений вида $f(x)/(x \pm i0)$ интеграл должен пониматься в смысле главного значения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x \pm i0} dx = \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx \mp i\pi f(0).$$

Второй член возникает от обхода полюса $x = -i0$ (или $x = i0$) по полуокружности сверху (или снизу).

Отметим также асимптотическое поведение функции $G(\omega, \mathbf{p})$ при $\omega \rightarrow \infty$. Из (8,7) имеем

$$G(\omega, \mathbf{p}) \approx \frac{4\pi^3}{\omega} \sum_m [A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m) + B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)].$$

Коэффициент при $1/\omega$ равен, как легко убедиться, компоненте Фурье по $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ от

$$\frac{1}{2} \{ \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}_2) + \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}_1) \} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

т. е. единице. Таким образом,

$$G(\omega, \mathbf{p}) \rightarrow 1/\omega \quad \text{при} \quad |\omega| \rightarrow \infty. \quad (8,15)$$

Главное свойство функции Грина в импульсном представлении состоит в том, что ее полюсы могут лежать только в точках $\omega = \epsilon_m - \mu$, где ϵ_m — определенные указанным выше образом дискретные энергии возбуждения системы. Каждая из этих энергий отвечает определенному значению импульса системы \mathbf{P}_m , о чем свидетельствует наличие соответствующей δ -функции в каждом полюсном члене функции Грина.

Нас, однако, интересует здесь функция Грина макроскопического тела. Это значит, что рассматривается предел, когда объем V и число частиц N стремятся к бесконечности (при заданном конечном значении отношения N/V). В этом пределе расстояния между уровнями системы стремятся к нулю, полюсы функции $G(\omega, \mathbf{p})$ сливаются и можно утверждать лишь, что эта функция имеет мнимую часть при значениях $\omega + \mu$ в непрерывной области возможных значений энергии возбуждения системы. Исключения составляют, однако, возбуждения, в которых весь импульс \mathbf{p} макроскопической системы может быть приписан всего одной квазичастице с определенным законом дисперсии $\epsilon(\mathbf{p})$ (напомним, что в основном состоянии системы $\mathbf{p} = 0$); таким значениям отвечают изолированные полюсы функции Грина.

Если же импульс \mathbf{p} складывается из импульсов нескольких квазичастиц, то энергия системы уже не определяется однозначно значением \mathbf{p} : заданный импульс системы может складываться различным образом из импульсов квазичастиц, сумма энергий которых пробегает при этом непрерывный ряд значений; интегрирование по всем таким состояниям устраняет полюс.

Таким образом, уравнением

$$G^{-1}(\epsilon - \mu, \mathbf{p}) = 0 \quad (8,16)$$

определяется закон дисперсии квазичастиц (В. Л. Бонч-Бруевич, 1955).

Подчеркнем, что способ определения энергии возбуждения, согласно (8,9), как раз соответствует определению энергии квазичастиц в теории Ландау. Действительно, разность $\epsilon_m^{(+)}$ есть изменение энергии системы при добавлении к ней одной частицы; приписав все это изменение одной квазичастице, мы определяем ϵ в соответствии с (1,3). Аналогичным образом, $-\epsilon_m^{(-)}$ есть изменение энергии при удалении одной частицы, так что $\epsilon_m^{(-)}$ есть энергия удаленной квазичастицы. Естественно поэтому, что $\epsilon_m^{(-)} < \mu$, так как в теории Ландау квазичастица может быть удалена только изнутри ферми-сферы¹⁾.

Поскольку все фигурирующие в разложении (8,7) возбужденные состояния получаются из основного состояния добавлением или удалением одной частицы (со спином 1/2), то ясно, что для системы фермионов полюсы функции Грина определяют лишь спектр элементарных возбуждений фермиевского типа. Как определяется бозевская ветвь, будет показано ниже, в § 18.

Описание спектра макроскопической системы с помощью понятия о квазичастицах с определенной зависимостью ϵ от p — приближенное описание, точность которого падает с увеличением $|\epsilon - \mu|$. Отклонение от картины независимых квазичастиц проявляется в сдвиге полюса функции Грина в комплексную область: энергия $\epsilon(p)$ становится комплексной. Согласно общим правилам квантовой механики (см. III § 134), комплексность уровней энергии означает конечность времени жизни τ возбужденного состояния системы ($\tau \sim 1/|\text{Im } \epsilon|$). Сама же величина $\text{Im } \epsilon$ характеризует степень «размазанности» значений энергии квазичастицы (ширина уровня). Разумеется, такая трактовка имеет смысл лишь при условии достаточной малости мнимой части: $|\text{Im } \epsilon| \ll |\epsilon - \mu|$. Как было объяснено в § 1, это условие действительно выполняется для слабо возбужденных состояний системы, поскольку $|\text{Im } \epsilon| \sim 1/\tau \propto (p - p_F)^2$, в то время как $\text{Re } (\epsilon - \mu) \propto |p - p_F|$.

Необходимый знак $\text{Im } \epsilon$ обеспечивается определенностью знака мнимой части функции Грина. Действительно, вблизи своего полюса эта функция имеет вид

$$G(\omega, p) \approx \frac{Z}{\omega + \mu - \epsilon(p)}, \quad (8,17)$$

причем постоянная $Z > 0$, как это следует из положительности коэффициентов A_m , B_m в разложении (8,7); величину Z часто называют (по аналогии с квантовой электродинамикой)

¹⁾ Обратим внимание на то, что в определение энергии квазичастиц $\epsilon_m^{(-)}$ возбужденный уровень системы E_m входит со знаком минус. С этим связан и тот факт, что импульс этих квазичастиц $p = -P_m$, как это видно из δ -функции $\delta(p + P_m)$ в соответствующих членах разложения (8,7).

перенормировочной постоянной. Мнимая часть функции Грина

$$\text{Im } G \approx \frac{Z \text{Im } \varepsilon}{|\omega + \mu - \varepsilon|^2}.$$

Заметив, что это выражение относится к значениям $\omega \approx \varepsilon - \mu$ и сравнив его знак с правилом (8,14), найдем, что

$$\begin{aligned} \text{Im } \varepsilon < 0 & \text{ при } \text{Re } \varepsilon > \mu, \\ \text{Im } \varepsilon > 0 & \text{ при } \text{Re } \varepsilon < \mu, \end{aligned} \quad (8,18)$$

как и должно быть: такой знак $\text{Im } \varepsilon$ в обоих случаях ($\varepsilon_m^{(+)}$ и $\varepsilon_m^{(-)}$ в (8,9)) соответствует правильной отрицательной мнимой добавке к энергии возбужденного состояния E_m .

К аналитическим свойствам гриновской функции мы вернемся еще в § 36, где этот вопрос будет рассмотрен сразу для общего случая произвольных температур.

§ 9. Функция Грина идеального ферми-газа

Для иллюстрации рассмотренных в предыдущем параграфе общих соотношений вычислим функцию Грина идеального газа.

Шредингеровские ψ -операторы всегда можно представить в виде разложения

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \hat{a}_{p\alpha} \Psi_{p\alpha}(\mathbf{r}) \quad (9,1)$$

по полному набору функций $\Psi_{p\alpha}$ — волновых функций свободной частицы с импульсом p (и энергией $p^2/2m$), т. е. по плоским волнам

$$\Psi_{p\alpha} = \frac{u_{\alpha}}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (9,2)$$

(u_{α} — спиновая амплитуда, нормированная условием $u_{\alpha} u_{\alpha}^* = 1$); такой выбор функций $\Psi_{p\alpha}$ не имеет отношения к реальному взаимодействию частиц в системе.

Но для системы невзаимодействующих частиц может быть записан в явном виде также и гейзенберговский ψ -оператор. В этом случае переход от шредингеровского к гейзенберговскому представлению сводится к введению в каждый член суммы в (9,1) соответствующего временного множителя

$$\hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) = \sum_{p\alpha} \hat{a}_{p\alpha} \Psi_{p\alpha}(\mathbf{r}) \exp \left[-i \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) t \right]. \quad (9,3)$$

В этом легко убедиться, заметив, что матричные элементы гейзенберговского оператора для всякого перехода $i \rightarrow f$ должны содержать множители $\exp[-i(E'_i - E'_f)t]$, где E'_i , E'_f — энергии