

ФУНКЦИИ ГРИНА ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

§ 36. Гриновские функции при конечных температурах¹⁾

Определение функции Грина макроскопической системы при отличных от нуля температурах отличается от их определения при нулевой температуре лишь тем, что усреднение по основному состоянию замкнутой системы заменяется усреднением по распределению Гиббса: символ $\langle \dots \rangle$ будет теперь обозначать

$$\langle \dots \rangle = \sum_n \omega_n \langle n | \dots | n \rangle, \quad \omega_n = \exp\left(\frac{\Omega - E'_n}{T}\right), \quad (36,1)$$

где суммирование производится по всем состояниям системы (отличающимся как энергией E_n , так и числом частиц N_n), $E'_n = E_n - \mu N_n$, а $\langle n | \dots | n \rangle$ — диагональный матричный элемент по n -му состоянию. Определенные таким образом средние значения являются функциями термодинамических переменных T, μ, V .

При исследовании аналитических свойств гриновских функций при конечных температурах (*Л. Д. Ландау, 1958*) целесообразно воспользоваться так называемыми запаздывающими и опережающими функциями Грина, аналитические свойства которых оказываются более простыми²⁾. Для определенности будем говорить сначала о ферми-системах.

Запаздывающая функция Грина определяется согласно

$$iG_{\alpha\beta}^R(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) + \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (36,2)$$

Для микроскопически однородной неферромагнитной системы, в отсутствие внешнего поля, эта функция (как и обычная $G_{\alpha\beta}$) сводится к скалярной функции, зависящей лишь от разности $X = X_1 - X_2$:

$$G_{\alpha\beta}^R(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta} G^R(X), \quad G^R = \frac{1}{2} G_{\alpha\alpha}^R. \quad (36,3)$$

¹⁾ В §§ 36—38 пользуемся системой единиц с $\hbar = 1$.

²⁾ Эти функции принято отличать индексами R и A — от английских слов retarded и advanced.

Переход к импульсному представлению осуществляется обычным образом. Но поскольку $G^R(t, \mathbf{r}) = 0$ при $t < 0$, то в определении

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \int_0^{\infty} \int e^{i(\omega t - \mathbf{p}\mathbf{r})} G^R(t, \mathbf{r}) dt d^3x \quad (36,4)$$

интегрирование по t производится фактически лишь от 0 до ∞ . Смещение переменной ω в верхнюю полуплоскость лишь улучшает сходимость такого интеграла. Поэтому интеграл (36,4) определяет в верхней полуплоскости ω аналитическую функцию, не имеющую особенностей¹⁾. В нижней же полуплоскости, где функция G^R определяется путем аналитического продолжения, она имеет полюсы (см. ниже).

Получим для функции G^R разложение, подобное выведенному в § 8 разложению (8,7) для функции G при $T=0$.

Раскрыв матричный элемент $\langle n | \dots | n \rangle$ от произведения ψ -операторов по правилу матричного умножения и выразив матричные элементы в виде (8,4), получим

$$iG^R(t, \mathbf{r}) = \\ = \frac{1}{2} \sum_{n, m} \omega_n \{ e^{-i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn}\mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(0) | n \rangle + \\ + e^{i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn}\mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha(0) | n \rangle \},$$

где

$$\omega_{mn} = E'_m - E'_n, \quad \mathbf{k}_{mn} = \mathbf{P}_m - \mathbf{P}_n.$$

Для двух членов в фигурных скобках суммирование по n и m имеет несколько различный смысл: в первом члене числа частиц в состояниях n и m связаны соотношением $N_m = N_n + 1$, а во втором: $N_m = N_n - 1$. Чтобы устранить это различие, взаимно переобозначим во второй сумме индексы m и n . Заметив также, что

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(0) | n \rangle = |\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 \equiv A_{mn},$$

приводим все выражение к виду

$$iG^R(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{n, m} \omega_n e^{-i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn}\mathbf{r})} A_{mn} (1 + e^{-\omega_{mn}t/T}), \quad t > 0. \quad (36,5)$$

¹⁾ Ср. аналогичные рассуждения для функции $\alpha(\omega)$ в V § 123. Сходство аналитических свойств функций G^R и α , разумеется, не случайно: согласно V (126,8), последняя выражается аналогичным образом через определенный операторный коммутатор.

Наконец, при вычислении интеграла (36,4) заменяем (как и в § 8) $\omega \rightarrow \omega + i0$ и окончательно находим:

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{m, n} \omega_n \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (36,6)$$

Обратим внимание на то, что все полюсы этого выражения расположены (в соответствии со сказанным выше) под вещественной осью, в нижней полуплоскости ω .

Последнее свойство достаточно для того, чтобы установить определенную связь между вещественной и мнимой частями функции — так называемое *соотношение Крамерса — Кронига*, или *дисперсионное соотношение*:

$$\operatorname{Re} G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(u, \mathbf{p})}{u - \omega} du \quad (36,7)$$

(см. вывод такого же соотношения для $\alpha(\omega)$ в V § 123). В его справедливости можно также убедиться и непосредственной проверкой, отделив в (36,6) вещественную и мнимую части с помощью формулы (8,11). Отметим также, что с учетом той же формулы можно переписать (36,7) в виде

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(u, \mathbf{p})}{u - \omega - i0} du, \quad (36,8)$$

где

$$\rho(u, \mathbf{p}) = -\frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{m, n} \omega_n A_{mn} \delta(u - \omega_{mn}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn}) (1 + e^{-\omega_{mn}/T}).$$

При вещественных ω имеем $\rho = \operatorname{Im} G^R$.

Представление (36,8) приобретает более глубокий смысл при переходе к «макроскопическому пределу» $V \rightarrow \infty$ (при заданном отношении N/V). В этом пределе полюсы ω_{mn} сливаются, и функция $\rho(u)$ делается отличной от нуля при всех u (а не просто равна сумме δ -функций в дискретных точках). При этом формула (36,8) непосредственно определяет $G^R(\omega)$ в верхней полуплоскости ω и на вещественной оси. Для определения же $G^R(\omega)$ в нижней полуплоскости ω необходимо произвести аналитическое продолжение интеграла, для чего следует деформировать контур интегрирования таким образом, чтобы он всегда огибал точку $u = \omega$ снизу. При этом $G^R(\omega)$ может иметь особенности в нижней полуплоскости (на конечном расстоянии от вещественной оси), когда контур «зажимается» между полюсом $u = \omega$ и особенностью числителя.

Опережающая функция Грина вводится аналогичным образом, согласно определению,

$$iG_{\alpha\beta}^A(X_1, X_2) = \begin{cases} 0 & t_1 > t_2, \\ -\langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) + \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (36,9)$$

Функция $G^A(\omega, p)$ в импульсном представлении является аналитической функцией переменной ω , не имеющей особенностей в нижней полуплоскости. Ее разложение отличается от (36,6) изменением знака перед $i0$ в знаменателях. Это значит, что на вещественной оси $G^A(\omega) = G^{R*}(\omega)$, а во всей плоскости ω :

$$G^A(\omega^*) = G^{R*}(\omega). \quad (36,10)$$

При $\omega \rightarrow \infty$ функции G^R и G^A стремятся к нулю по тому же закону, что и функция G :

$$G^R, G^A \rightarrow 1/\omega \quad \text{при} \quad |\omega| \rightarrow \infty. \quad (36,11)$$

Напомним (см. вывод (8,15)), что коэффициент (единица) в этом асимптотическом выражении определяется величиной скачка функции при $t_2 = t_1$; этот скачок не зависит от температуры и одинаков для всех трех функций G^R, G^A, G , как это ясно из их определений.

Для установления связи между введенными таким образом функциями G^R, G^A и обычной функцией Грина

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \langle T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \rangle \quad (36,12)$$

получим для последней разложение, аналогичное (36,5). Вычисления, вполне аналогичные произведенным выше, приводят к результату ¹⁾:

$$G(\omega, p) = -\frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{m, n} \omega_n A_{mn} \delta(p - k_{mn}) \times \\ \times \left\{ \frac{1}{\omega_{mn} - \omega} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}) + i\pi \delta(\omega - \omega_{mn}) (1 - e^{-\omega_{mn}/T}) \right\}. \quad (36,13)$$

Сравнив (36,13) и (36,6), найдем

$$\left. \begin{aligned} G^R(\omega, p) \\ G^A(\omega, p) \end{aligned} \right\} = \text{Re } G(\omega, p) \pm i \text{cth} \frac{\omega}{2T} \text{Im } G(\omega, p). \quad (36,14)$$

При этом, как видно из того же выражения (36,13):

$$\text{sign Im } G(\omega, p) = -\text{sign } \omega. \quad (36,15)$$

¹⁾ При переходе к импульсному представлению интеграл по t разбивается на две части — от $-\infty$ до 0 и от 0 до ∞ , причем в одной из них производится переобозначение индексов суммирования m, n .

Обратим внимание на то, что функция G , в отличие от G^R и G^A , не является аналитической функцией ω .

При $T \rightarrow 0$ имеем $\text{cth}(\omega/2T) \rightarrow \text{sign} \omega$, и из (36,14) следует, что на вещественной оси

$$G = \begin{cases} G^R, & \omega > 0, \\ G^A, & \omega < 0. \end{cases} \quad (36,16)$$

Таким образом, функция $G(\omega)$ при $T=0$ представляет собой на двух вещественных полуосях ω предельные значения (при $|\text{Im} \omega| \rightarrow 0$) двух различных аналитических функций: $G^R(\omega)$ на правой и $G^A(\omega)$ на левой полуоси.

Легко написать выражения функций G^R , G^A для идеального ферми-газа. Достаточно заметить, что они удовлетворяют тому же уравнению (9,6), в выводе которого использовано лишь значение скачка функции при $t_i = t_2$. Способ же обхода полюса известен из того, что для $G^{(0)R}$ он должен проходить под, а для $G^{(0)A}$ — над вещественной осью. Отсюда следует выражение

$$G^{(0)R, A}(\omega, p) = \left[\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \pm i0 \right]^{-1}, \quad (36,17)$$

справедливое как при нулевой, так и при конечных температурах. Для функции же $G^{(0)}$ находим, согласно (36,14),

$$G^{(0)}(\omega, p) = P \frac{1}{\omega - p^2/2m + \mu} - i\pi \text{th} \frac{\omega}{2T} \cdot \delta \left(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \right). \quad (36,18)$$

При $T \rightarrow 0$ мы вернемся к формуле (9,7), отличающейся от (36,17) заменой $\pm i0$ на $i0 \cdot \text{sign} \omega$.

Приведем аналогичные формулы для случая бозе-системы. Запаздывающая и опережающая функции Грина определяются согласно:

$$iG^R(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^+(X_2) - \hat{\Psi}^+(X_2) \hat{\Psi}(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2, \end{cases} \quad (36,19)$$

$$iG^A(X_1, X_2) = \begin{cases} 0, & t_1 > t_2, \\ -\langle \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^+(X_2) - \hat{\Psi}^+(X_2) \hat{\Psi}(X_1) \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases}$$

Если при этом идет речь о температурах выше λ -точки, то в этих определениях фигурируют полные ψ -операторы; при температурах же ниже λ -точки определение относится к надконденсатным операторам. Вместо (36,6) имеем теперь

$$G^R(\omega, p) = (2\pi)^3 \sum_{m, n} \omega_n \frac{A_{mn} \delta(p - k_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 - e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (36,20)$$

Связь же этой функции с G дается формулой

$$G^R(\omega, p) = \text{Re} G(\omega, p) + i \text{th} \frac{\omega}{2T} \cdot \text{Im} G(\omega, p), \quad (36,21)$$

причем на вещественной оси

$$\operatorname{Im} G(\omega, p) < 0 \quad (36,22)$$

(функция G определяется, согласно (31,1), с усреднением по распределению Гиббса вместо усреднения по основному состоянию). Для идеального бозе-газа функция G^R дается той же формулой (36,17), а функция G :

$$G^{(0)}(\omega, p) = P \frac{1}{\omega - p^2/2m + \mu} - i\pi \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \cdot \delta \left(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \right). \quad (36,23)$$

Физический смысл функций Грина при отличных от нуля температурах в основном совпадает с их смыслом при $T=0$. Разумеется, остаются справедливыми формулы, связывающие гриновскую функцию G с импульсным распределением частиц (7,23) и вообще с матрицей плотности (7,18), (31,4).

Остаются в силе также и основные утверждения о совпадении полюсов функции Грина с энергией элементарных возбуждений (поскольку, однако, сама функция G не аналитична, то при этом удобнее говорить о полюсах аналитической функции G^R , которые она имеет в нижней полуплоскости ω , или о полюсах функции G^A в верхней полуплоскости). Это утверждение снова (как и в § 8) следует из разложения (36,6). Хотя в различных членах этого разложения фигурируют теперь частоты переходов ω_{mn} между любыми двумя состояниями системы, но (после перехода к макроскопическому пределу) по-прежнему остаются полюсы, отвечающие лишь переходам из основного состояния в состоянии с одним элементарным возбуждением. Переходы же между двумя возбужденными состояниями не приводят к возникновению полюса в макроскопической одночастичной функции Грина по той же причине, по которой не приводят к возникновению полюса и переходы из основного в состояния с более чем одной квазичастицей (см. § 8): разность энергий таких состояний не определяется однозначным образом разностью их импульсов.

Подчеркнем также, что при отличных от нуля температурах продолжительность жизни квазичастиц связана не только с их собственной неустойчивостью, но и с их столкновениями друг с другом. Затухание от обоих этих источников должно быть слабым для того, чтобы понятие о квазичастицах продолжало иметь смысл.

§ 37. Температурные функции Грина

Для построения диаграммной техники вычисления гриновской функции при конечных температурах надо было бы перейти от гейзенберговского представления ψ -операторов к представлению