

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

взаимодействия, как это было сделано в § 12. При этом мы снова пришли бы к выражению, отличающемуся от (12,12) лишь тем, что усреднение производится не по основному состоянию. Это отличие, однако, очень существенно: усреднение оператора \hat{S}^{-1} уже не может быть отделено от усреднения остальных множителей, как это было сделано при переходе от (12,12) к (12,14); дело в том, что неосновное состояние под влиянием оператора \hat{S}^{-1} переводится не само в себя, а в некоторую суперпозицию возбужденных состояний с той же энергией (включающую в себя результаты всевозможных процессов взаимного рассеяния квазичастиц). Это обстоятельство приводит к существенному усложнению диаграммной техники — возникают новые члены от свертываний, в которых участвуют также и ψ -операторы из \hat{S}^{-1} .

Можно, однако, изменить определение гриновской функции таким образом, чтобы подобных усложнений не возникало. Основанный на этом определении математический аппарат, разработанный Мацубарой (*T. Matsubara*, 1955), в особенности целесообразен для вычисления термодинамических величин макроскопической системы.

Введем так называемые мацубаровские ψ -операторы, согласно определению ¹⁾,

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_{\alpha}^M(\tau, \mathbf{r}) &= e^{\tau\hat{H}'}\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{r})e^{-\tau\hat{H}'}, \\ \hat{\Psi}_{\alpha}^M(\tau, \mathbf{r}) &= e^{\tau\hat{H}'}\hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r})e^{-\tau\hat{H}'},\end{aligned}\quad (37,1)$$

где τ — вспомогательная вещественная переменная; эти операторы отличаются, с формальной точки зрения, от гейзенберговских операторов заменой в последних вещественной переменной t мнимой величиной $-i\tau$ ²⁾. Такой же заменой ($\hat{\Psi} \rightarrow \hat{\Psi}^M$, $\hat{\Psi}^{\pm} \rightarrow \hat{\Psi}^M$, $i\partial/\partial t \rightarrow -\partial/\partial\tau$), например в (7,8), получаются уравнения, которым удовлетворяют операторы (37,1). С помощью этих операторов новая функция Грина \mathcal{G} определяется аналогично тому, как обычная гриновская функция G определяется через гейзенберговские ψ -операторы:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) = -\langle T_{\tau}\hat{\Psi}_{\alpha}^M(\tau_1, \mathbf{r}_1)\hat{\Psi}_{\beta}^M(\tau_2, \mathbf{r}_2)\rangle, \quad (37,2)$$

где символ T_{τ} означает « τ -хронологизацию» — расположение опе-

¹⁾ В этом параграфе мы будем писать формулы одновременно для ферми-систем и бозе-систем (выше λ -точки). При разнице в знаках ферми-системам будут отвечать верхние, и бозе-системам — нижние знаки. Кроме того, для бозе-систем следует опустить спиновые индексы.

²⁾ Подчеркнем, что в виду этого отличия оператор $\hat{\Psi}^M$ отнюдь не совпадает с $\hat{\Psi}^{M+}$.

раторов в порядке увеличения τ справа налево (с изменением знака при перестановке операторов в случае ферми-систем); скобки же $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по распределению Гиббса. Последнее можно представить в явном виде, записав определение (37,2) как

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta} = -\text{Sp} \{ \hat{w} T_{\tau} \hat{\Psi}_{\alpha}^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_{\beta}^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \}, \quad \hat{w} = \exp\left(\frac{\Omega - \hat{H}'}{T}\right), \quad (37,3)$$

где Sp означает сумму всех диагональных матричных элементов. Определенную таким образом гриновскую функцию называют *температурной* в отличие от «обычной» функции G (которую называют в этой связи *временной*).

Как и $G_{\alpha\beta}$, функция $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ для неферромагнитной системы в отсутствие внешнего магнитного поля сводится к скаляру: $\mathcal{G}_{\alpha\beta} = \mathcal{G} \delta_{\alpha\beta}$. Для пространственно-однородной системы ее зависимость от \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 снова сводится к зависимости от разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Легко также видеть, что уже по самому определению (37,3) функция \mathcal{G} зависит только от разности $\tau = \tau_1 - \tau_2$. Пусть, например, $\tau_1 < \tau_2$; тогда имеем¹⁾

$$\mathcal{G} = \pm \frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-\hat{H}'/T} e^{\tau_2 \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}_2) e^{-(\tau_2 + \tau_1) \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}_1) e^{-\tau_1 \hat{H}'} \}$$

или, произведя под знаком Sp циклическую перестановку множителей:

$$\mathcal{G} = \pm \frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-(1/T + \tau) \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}^+(\mathbf{r}_2) e^{\tau \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \}, \quad \tau < 0, \quad (37,4)$$

откуда и очевидно сделанное утверждение.

Переменная τ будет фактически пробегать значения лишь в конечном интервале

$$-1/T \leq \tau \leq 1/T. \quad (37,5)$$

При этом значения функции $\mathcal{G}(\tau)$ при $\tau < 0$ и $\tau > 0$ связаны друг с другом простым соотношением. При $\tau = \tau_1 - \tau_2 > 0$, аналогично выводу (37,4), находим

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-(1/T - \tau) \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}_1) e^{-\tau \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}^+(\mathbf{r}_2) \} = \\ &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-\tau \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}^+(\mathbf{r}_2) e^{-(1/T - \tau) \hat{H}'} \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}_1) \}, \quad \tau > 0, \end{aligned}$$

1) Заключенный в скобки множитель 2 относится к ферми-системам, а для бозе-систем должен быть заменен единицей.

а сравнив это выражение с (37,4), получим

$$\mathcal{G}(\tau) = \mp \mathcal{G}\left(\tau + \frac{1}{T}\right), \quad \tau < 0 \quad (37,6)$$

(ввиду (37,5) аргумент функции справа при $\tau < 0$ положителен).

Разложим теперь функцию $\mathcal{G}(\tau, \mathbf{r})$ в интеграл Фурье по координатам и в ряд Фурье по τ (на интервале (37,5))¹⁾:

$$\mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}) = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int e^{i(\mathbf{pr} - \zeta_s \tau)} \mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}, \quad (37,7)$$

причем для ферми-систем

$$\zeta_s = (2s + 1)\pi T, \quad (37,8a)$$

а для бозе-систем

$$\zeta_s = 2s\pi T \quad (37,8b)$$

($s=0, \pm 1, \pm 2, \dots$); при этом автоматически выполняется условие (37,6). Обратное к (37,7) преобразование имеет вид

$$\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = \int_0^{1/T} \int e^{-i(\mathbf{pr} - \zeta_s \tau)} \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}) d^3 x d\tau \quad (37,9)$$

(интеграл по области $-1/T \leq \tau \leq 1/T$ преобразован в интеграл от 0 до $1/T$ с учетом (37,6) и (37,8)).

Вычисления, аналогичные произведенным в § 36, позволяют выразить $\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p})$ через матричные элементы шредингеровских ψ -операторов. Они приводят к результату

$$\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = \frac{(2\pi)^3}{(2)} \sum_{m, n} \omega_n \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{i\zeta_s - \omega_{mn}} (1 \pm e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (37,10)$$

Отсюда видно прежде всего, что

$$\mathcal{G}(-\zeta_s, \mathbf{p}) = \mathcal{G}^*(\zeta_s, \mathbf{p}). \quad (37,11)$$

Далее, сравнив (37,10) с разложениями (36,6) и (36,20) для G^R , найдем, что

$$\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = G^R(i\zeta_s, \mathbf{p}), \quad \zeta_s > 0. \quad (37,12)$$

Условие $\zeta_s > 0$ связано с тем, что выражения (36,6) и (36,20) справедливы непосредственно лишь в верхней полуплоскости ω , как это объяснено на стр. 174. Таким образом, в компонентах Фурье температурная функция Грина совпадает с запаздывающей функцией Грина, взятой в дискретных точках мнимой оси ω .

¹⁾ Введение этого приема принадлежит А. А. Абрикосову, Л. П. Горькову, И. Е. Дзялошинскому (1959) и Е. С. Фрадкину (1959).

Этот результат позволяет, в частности, сразу написать выражение для температурной функции Грина идеального газа: заменой $\omega \rightarrow i\zeta_s$ находим из (36,17)

$$\mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s, \rho) = \left[i\zeta_s - \frac{\rho^2}{2m} + \mu \right]^{-1}. \quad (37,13)$$

В следующем параграфе будет изложена диаграммная техника для вычисления функции $\mathcal{G}(\zeta_s, \rho)$. Для определения же функции $G^R(\omega, \rho)$ (и тем самым, в частности, для определения энергетического спектра системы) надо построить аналитическую функцию, совпадающую с $\mathcal{G}(\zeta_s, \rho)$ в точках $\omega = i\zeta_s$ и не имеющую особенностей в верхней полуплоскости ω . Эта процедура однозначна, если добавить требование $G^R(\omega, \rho) \rightarrow 0$ при $|\omega| \rightarrow \infty$ (см. (36,11)). Тем не менее в конкретных случаях такое аналитическое продолжение может быть сопряжено с определенными трудностями. Но для вычисления термодинамических величин его производить не надо.

Так, для вычисления потенциала Ω можно исходить из выражения усредненной по распределению Гиббса матрицы плотности

$$N\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_1 + 0, \mathbf{r}_2) \quad (37,14)$$

(очевидного из определения (37,2); ср. (7,17)). Положив $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$ (и просуммировав по $\alpha = \beta$), получим для плотности системы

$$\frac{N}{V} = \pm T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \mathcal{G}(\zeta_s, \rho) e^{-i\zeta_s \tau} \frac{d^3\rho}{(2\pi)^3} \Big|_{\tau \rightarrow -0}. \quad (37,15)$$

Это выражение определяет N как функцию μ , T , V , после чего $\Omega(\mu, T, V)$ вычисляется интегрированием равенства $N = -\partial\Omega/\partial\mu$.

§ 38. Диаграммная техника для температурных функций Грина

Диаграммная техника для вычисления температурной функции Грина \mathcal{G} строится подобно тому, как это делалось в §§ 12, 13 для временной функции G . Тот факт, что определение мацубаровских ψ -операторов (37,1) отличается от определения гейзенберговских операторов лишь формальной заменой $it \rightarrow \tau$, позволяет во многом воспользоваться прямой аналогией.

Прежде всего вводим мацубаровские операторы в «представлении взаимодействия», отличающиеся от (37,1) заменой точного гамильтониана \hat{H}' на гамильтониан свободных частиц \hat{H}'_0 :

$$\hat{\Psi}_{\alpha\beta}^M(\tau, \mathbf{r}) = \exp(\tau\hat{H}'_0) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{r}) \exp(-\tau\hat{H}'_0). \quad (38,1)$$

Связь между операторами $\hat{\Psi}_{\alpha\beta}^M$ и $\hat{\Psi}_{\alpha}^M$ осуществляется мацуба-