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

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

В следующем параграфе будет изложена диаграммная техника для вычисления функции $\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p})$. Для определения же функции $G^R(\omega, \mathbf{p})$ (и тем самым, в частности, для определения энергетического спектра системы) надо построить аналитическую функцию, совпадающую с $\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p})$ в точках $\omega = i\zeta_s$ и не имеющую особенностей в верхней полуплоскости ω. Эта процедура однозначна, если добавить требование $G^R(\omega, \mathbf{p}) \longrightarrow 0$ при $|\omega| \longrightarrow \infty$ (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

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

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

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

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 $it \longrightarrow \tau$, 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 $\hat{H}'_0$:

$$\hat{\Psi}^M_{0\alpha}(\tau, \mathbf{r}) = \exp(\tau\hat{H}'_0)\, \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \exp(-\tau\hat{H}'_0). \qquad (38,1)$$

Связь между операторами $\hat{\Psi}^M_{0\alpha}$ и $\hat{\Psi}^M_\alpha$ осуществляется мацубаровской S-матрицей, построенной аналогично (12,8):

$$\hat{\sigma}(\tau_2, \tau_1) = \mathrm{T}_\tau \exp\left\{-\int_{\tau_1}^{\tau_2} \hat{V}_0(\tau)\, d\tau\right\}, \tag{38,2}$$

где

$$\hat{V}_0(\tau) = \exp(\tau\hat{H}_0')\, \hat{V} \exp(-\tau\hat{H}_0') \tag{38,3}$$

— оператор взаимодействия в том же представлении. Но в то время как в § 12 связь между $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}_0$ устанавливалась при начальном условии «включения» взаимодействия при $t = -\infty$, теперь роль «начального» условия должно играть совпадение $\hat{\Psi}^M$ и $\hat{\Psi}_0^M$ при $\tau = 0$. Соответственно вместо (12,11) пишем

$$\hat{\Psi}_\alpha^M(\tau) = \hat{\sigma}^{-1}(\tau, 0)\, \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau)\, \hat{\sigma}(\tau, 0). \tag{38,4}$$

Подставим это выражение в определение функции Грина (37,3); положив, для определенности, $\tau_1 > \tau_2$, имеем

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = \\ = -\operatorname{Sp}\{\hat{w}\hat{\sigma}^{-1}(\tau_1, 0)\, \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1)\, \hat{\sigma}(\tau_1, 0)\, \hat{\sigma}^{-1}(\tau_2, 0)\, \hat{\bar{\Psi}}_{0\beta}^M(\tau_2)\, \hat{\sigma}(\tau_2, 0)\}$$

(аргументы $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ для краткости не выписываем). Заметив, что при $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3$

$$\hat{\sigma}(\tau_1, \tau_3) = \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_2)\, \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_3),$$
$$\hat{\sigma}(\tau_2, \tau_1)\, \hat{\sigma}^{-1}(\tau_3, \tau_1) = \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_3),$$

переписываем в виде

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = \\ = -\operatorname{Sp}\left\{\hat{w}\hat{\sigma}^{-1}\left(\frac{1}{T}, 0\right)\left[\hat{\sigma}\left(\frac{1}{T}, \tau_1\right)\hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1)\, \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_2)\, \hat{\bar{\Psi}}_{0\beta}^M(\tau_2)\hat{\sigma}(\tau_2, 0)\right]\right\}.$$

Множители в квадратных скобках уже расположены в порядке возрастания справа налево. Поэтому можно написать

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\operatorname{Sp}\{\hat{w}\hat{\sigma}^{-1}[\mathrm{T}_\tau \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1)\, \hat{\bar{\Psi}}_{0\beta}^M(\tau_2)\, \hat{\sigma}]\}, \tag{38,5}$$

где

$$\hat{\sigma} \equiv \hat{\sigma}\left(\frac{1}{T}, 0\right).$$

Легко проверить, что в таком виде это выражение остается справедливым и при $\tau_1 < \tau_2$.

В отличие от (12,12), в (38,5) содержится лишний (гиббсовский) множитель, и, кроме того, усреднение производится еще по состояниям системы взаимодействующих частиц. Покажем, что оба эти отличия «взаимно погашаются», в результате чего восстанавливается полная аналогия с (12,14). Для этого воспользуемся формулой

$$e^{-\tau\hat{H}'} = e^{-\tau\hat{H}'_0}\hat{\sigma}(\tau,\ 0), \tag{38,6}$$

которая получается путем подстановки (38,1) в (38,4) и последующим сравнением получившегося выражения с определением $\hat{\Psi}^M$ согласно (37,1). С ее помощью заменяем в (38,5)

$$e^{-\hat{H}'/T}\hat{\sigma}^{-1}\left(\frac{1}{T},\ 0\right) = e^{-\hat{H}'_0/T}$$

Множитель же $e^{\Omega/T}$ выносим из-под знака Sp, перенеся его из числителя в знаменатель и представив в виде

$$e^{-\Omega/T} = \mathrm{Sp}\, e^{-\hat{H}'/T} = \mathrm{Sp}\, e^{-\hat{H}'_0/T}\,\hat{\sigma}\left(\frac{1}{T},\ 0\right).$$

Наконец, умножив числитель и знаменатель на $\exp(\Omega_0/T)$ (где Ω_0 — термодинамический потенциал идеального газа при тех же значениях μ, T, V), получим окончательно

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1,\ \tau_2) = -\frac{1}{\langle\hat{\sigma}\rangle_0}\langle \mathrm{T}_\tau \hat{\Psi}^M_{0\alpha}(\tau_1)\,\hat{\bar{\Psi}}^M_{0\beta}(\tau_2)\,\hat{\sigma}\rangle_0, \tag{38,7}$$

где усреднение производится по состояниям системы невзаимодействующих частиц:

$$\langle .\ .\rangle_0 = \mathrm{Sp}\,\{\hat{w}_0 \ldots\}.$$

Аналогия этого результата с (12,14) очевидна.

Для перехода к диаграммам теории возмущений, как и в § 13, разлагаем выражение (38,7) по степеням оператора взаимодействия $\hat{V}_0(\tau)$. Для системы с парным взаимодействием между частицами этот оператор отличается от (13,2) лишь заменой гейзенберговских $\hat{\Psi}_0$, $\hat{\Psi}_0^+$ на мацубаровские $\hat{\Psi}^M$, $\hat{\bar{\Psi}}^M$. Средние значения произведений ψ-операторов снова раскрываются по теореме Вика (т. е. путем выбора всеми возможными способами попарных сверток операторов); применимость этой теоремы в макроскопическом пределе доказывается в данном случае теми же рассуждениями, что и в § 13.

Возникающие, таким образом, правила диаграммной техники вполне аналогичны правилам, полученным в § 13 для техники при $T=0$. Графическое изображение диаграмм остается в точности тем же. Несколько меняются лишь правила аналитического прочтения диаграмм.

В координатном представлении каждой сплошной линии, идущей от точки 2 в точку 1, сопоставляется множитель $-\mathcal{G}^{(0)}_{\alpha\beta}(\tau_1,\ \mathbf{r}_1;\ \tau_2,\ \mathbf{r}_2)$ (со знаком минус). Каждому пунктиру, соединяющему точки 1 и 2, отвечает множитель $-U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,\delta(\tau_1-\tau_2)$.

По всем переменным τ, $\mathbf{r}$ внутренних точек диаграммы производится интегрирование по d^3x по всему пространству и по $d\tau$—в пределах от 0 до $1/T$.

Для перехода к импульсному представлению надо разложить все функции $\mathcal{G}^{(0)}$ в виде (37,7). После интегрирования по всем внутренним переменным $\mathbf{r}$ в каждой вершине диаграммы возникает δ-функция, выражающая закон сохранения импульса ($\Sigma\mathbf{p}=0$). Кроме того, в каждой вершине возникает интеграл вида

$$\int_0^{1/T} \exp\{-i\tau(\zeta_{s_1}+\zeta_{s_2}+\zeta_{s_3})\}\,d\tau.$$

Этот интеграл (с учетом (37.8)) отличен от нуля, только если $\Sigma\zeta_s=0$, причем в этом случае равен 1. Таким образом, в каждой вершине соблюдается также и закон сохранения дискретных частот. Каждой сплошной линии ставится теперь в соответствие множитель $-\mathcal{G}^{(0)}_{\alpha\beta}(\zeta_s, \mathbf{p})$ (сплошной же линии, замкнутой на себя, снова отвечает множитель $n^{(0)}(\mu, T)$—плотность идеального газа при заданных μ, T). Каждой пунктирной линии сопоставляется множитель $-U(\mathbf{q})$. По всем импульсам и частотам, оставшимся неопределенными (после учета законов сохранения во всех вершинах), производится интегрирование и суммирование вида

$$T\sum_{s=-\infty}^{\infty}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\cdots$$

Общий коэффициент, с которым диаграмма входит в $-\mathcal{G}_{\alpha\beta}$, в случае ферми-систем равен $(-1)^L$, где L—число замкнутых последовательностей сплошных линий в диаграмме. В случае же бозе-систем этот коэффициент равен 1.

Разумеется, и в этой технике (как и в технике при $T=0$) можно производить частичное суммирование и вводить различные диаграммные «блоки». В частности, можно определить вершинную часть, выражающуюся через двухчастичную функцию Грина. Эта вершинная часть связана с функцией $\mathcal{G}$ уравнением Дайсона, аналогичным (15,14). Мы не будем выписывать такие формулы, вывод которых вполне аналогичен выводу в диаграммной технике при $T=0$.

При переходе к случаю $T=0$ суммы по s в мацубаровских диаграммах превращаются в интегралы по ζ и мацубаровская техника превращается в технику, очень напоминающую обычную, изложенную в главе II. Разница, однако, состоит в том, что при вещественных ζ мацубаровские функции совпадают со значениями G^R и G^A на соответствующих полуосях мнимой оси (см. (37,11—12)). Для перехода к обычной технике при $T=0$ надо еще повернуть контур интегрирования до совпадения с вещественной осью ω.