ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ

§ 91. Мацубаровская восприимчивость

Исследование поведения различных систем в слабом переменном внешнем поле сводится обычно к вычислению соответствующих обобщенных восприимчивостей. В этом параграфе будут выведены формулы, связывающие обобщенную восприимчивость с некоторой вспомогательной величиной, которую можно вычислять с помощью мацубаровской диаграммной техники; тем самым открывается путь для использования этой техники при исследовании кинетических свойств систем (*А. А. Абрикосов, И. Е. Дзялошинский, Л. П. Горьков*, 1962).

Напомним определение обобщенной восприимчивости $\alpha(\omega)$ (см. V, § 123). Пусть внешнее воздействие на систему описывается введением в ее гамильтониан возмущающего оператора вида

$$\hat{V}(t) = -\hat{x} f(t), \tag{91,1}$$

где $\hat{x}$ — шредингеровский (независящий от времени) оператор некоторой физической величины, характеризующей систему, а возмущающая обобщенная сила $f(t)$ есть заданная функция времени; предполагается, что в отсутствие внешнего воздействия среднее значение величины x равно нулю. Тогда в первом по f приближении имеется линейная связь между фурье-компонентами среднего значения $\bar{x}(t)$ и силой $f(t)$; обобщенная восприимчивость есть коэффициент в этом соотношении:

$$\bar{x}_\omega = \alpha(\omega) f_\omega. \tag{91,2}$$

Согласно формуле Кубо (см. V, § 126), функция $\alpha(\omega)$ может быть представлена в операторном виде как

$$\alpha(\omega) = i \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle \hat{x}_0(t) \hat{x}_0(0) - \hat{x}_0(0) \hat{x}_0(t) \rangle \, dt, \tag{91,3}$$

где $\hat{x}_0(t)$ — гейзенберговский оператор, определенный по невозмущенному гамильтониану системы (о чем напоминает индекс 0), а усреднение производится по заданному невозмущенному стационарному состоянию системы, или по распределению Гиббса с невозмущенным гамильтонианом[1]).

[1]) Во всей этой главе полагаем $\hbar = 1$.

Рассмотрим теперь, чисто формальным образом, систему, подчиняющуюся «мацубаровским» уравнениям движения, отличающимся от реальных уравнений заменой времени $t \to i\tau$; новая переменная τ пробегает значения в конечном интервале

$$-1/T \leqslant \tau \leqslant 1/T. \tag{91,4}$$

Пусть на эту систему налагается возмущение

$$\hat{V}(\tau) = -\hat{x}f(\tau). \tag{91,5}$$

Функцией переменной τ будет тогда и среднее значение $\bar{x}$. Разложим функцию $f(\tau)$ в ряд Фурье на интервале (91,4):

$$f(\tau) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} f_s e^{-i\zeta_s\tau}, \qquad \zeta_s = 2\pi sT \tag{91,6}$$

и аналогичным образом — функцию $\bar{x}(\tau)$ [1]). *Мацубаровской восприимчивостью* назовем коэффициент пропорциональности между компонентами обоих разложений:

$$\bar{x}_s = \alpha_M(\zeta_s) f_s. \tag{91,7}$$

Наша цель состоит теперь, с одной стороны, в получении для $\alpha_M(\zeta_s)$ формулы, аналогичной (91,3), и, с другой стороны, в нахождении связи между $\alpha_M(\zeta_s)$ и интересующей нас функцией $\alpha(\omega)$. Начнем с первой части задачи.

Пусть $\hat{H}$ — невозмущенный гамильтониан системы. «Точный» мацубаровский оператор величины x вычисляется по формуле [2])

$$\hat{x}^M(\tau) = \hat{\sigma}^{-1}(\tau, 0)\hat{x}_0^M(\tau)\hat{\sigma}(\tau, 0), \tag{91,8}$$

где $\hat{\sigma}$ — мацубаровская S-матрица:

$$\hat{\sigma}(\tau, 0) = \mathrm{T}_\tau \exp\left\{-\int_0^\tau \hat{V}_0^M(\tau')\,d\tau'\right\}, \tag{91,9}$$

а индексом 0 отмечены операторы в мацубаровском «представлении взаимодействия» [3]):

$$\hat{x}_0^M(\tau) = \exp(\tau\hat{H}_0)\,\hat{x}\exp(-\tau\hat{H}_0) \tag{91,10}$$

[1]) Для величины x, имеющей классический предел, должна использоваться техника, отвечающая случаю статистики Бозе; поэтому разложение (91,6) производится по «четным частотам» ζ_s.

[2]) Все используемые ниже понятия и формулы даны в IX, § 38.

[3]) Формула (91,8) справедлива и в том случае, когда исходный оператор $\hat{V}(\tau)$ зависит явно от переменной τ (хотя это и не подразумевалось при выводе в IX, § 38).

и аналогично для $\hat{V}_0^M(\tau)$. В первом порядке теории возмущений выражение (91,9) сводится к

$$\hat{\sigma}(\tau,\ 0) \approx 1 - \int_0^\tau \hat{V}_0^M(\tau')\,d\tau'. \tag{91,11}$$

Вычислим усредненное по распределению Гиббса значение

$$\overline{x}(\tau) = \operatorname{Sp}\{e^{-\hat{H}/T}\hat{x}^M(\tau)\}. \tag{91,12}$$

Согласно формуле IX, (38,6), имеем

$$e^{-\hat{H}/T} = e^{-\hat{H}_0/T}\hat{\sigma}\left(\frac{1}{T},\ 0\right) \approx \exp(-\hat{H}_0/T)\left(1 - \int_0^{1/T} \hat{V}_0^M(\tau')\,d\tau'\right),$$

а согласно (91,8) и (91,11),

$$\hat{x}^M(\tau) \approx \hat{x}_0^M(\tau) - \int_0^\tau \{\hat{x}_0^M(\tau)\hat{V}_0^M(\tau') - \hat{V}_0^M(\tau')\hat{x}_0^M(\tau)\}\,d\tau'.$$

Подставив эти выражения в (91,12), получим с той же точностью:

$$\overline{x}(\tau) = \operatorname{Sp}\left\{e^{-\hat{H}_0/T}\left[\int_0^\tau (\hat{V}_0^M(\tau')\hat{x}_0^M(\tau) - \hat{x}_0^M(\tau)\hat{V}_0^M(\tau'))\,d\tau' - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \int_0^{1/T} \hat{V}_0^M(\tau')\hat{x}_0(\tau)\,d\tau'\right]\right\}.$$

В первом интеграле переменная $\tau' < \tau$, а во втором делим область интегрирования на интервалы от 0 до τ и от τ до $1/T$. После сокращений и подстановки $\hat{V}_0(\tau)$ из (91,5) видим, что результат может быть записан в виде

$$\overline{x}(\tau) = \int_0^{1/T} f(\tau')\langle \mathrm{T}_\tau \hat{x}_0^M(\tau)\hat{x}_0^M(\tau')\rangle\,d\tau' \tag{91,13}$$

(напомним, что оператор T_τ хронологизации по переменной τ расставляет множители, без изменения знака произведения, в порядке возрастания τ справа налево); усреднение в (91,13) производится по распределению Гиббса с гамильтонианом $\hat{H}_0$. Результат усреднения зависит только от разности $\tau - \tau'$. Наконец, представив $f(\tau')$ в виде фурье-разложения (91,6), получим окончательно искомую формулу для мацубаровской восприимчивости:

$$\alpha_M(\zeta_s) = \int_0^{1/T} e^{i\zeta_s\tau}\langle \mathrm{T}_\tau \hat{x}_0^M(\tau)\hat{x}_0^M(0)\rangle\,d\tau. \tag{91,14}$$

Мы видим, что $\alpha_M(\zeta_s)$ выражается через фурье-компоненту мацубаровской гриновской функции, построенной по операторам $\hat{x}$ (ср. определение IX, (37,2)). Обратим внимание на отличие от формулы (91,3) для $\alpha(\omega)$, в которой стоит запаздывающий (по времени t) коммутатор, а не хронологизированное произведение.

Для решения второй части поставленной задачи — нахождения связи между функциями $\alpha(\omega)$ и $\alpha_M(\zeta_s)$ — надо, исходя из формул (91,3) и (91,14), выразить эти функции через матричные элементы оператора $\hat{x}$. Мы не будем проводить здесь соответствующие вычисления, поскольку они практически совпадают с вычислениями, проводившимися уже по другим аналогичным поводам (ср. V, § 126; IX, §§ 36, 37). Ограничимся указанием результата:

$$\alpha(\omega)=\sum_{m,\ n} e^{-E_n/T}\frac{|x_{mn}|^2}{\omega-\omega_{mn}+i0}\left(1-e^{-\omega_{mn}/T}\right), \qquad (91,15)$$

$$\alpha_M(\zeta_s)=\sum_{m,\ n} e^{-E_n/T}\frac{|x_{mn}|^2}{i\zeta_s-\omega_{mn}}\left(1-e^{-\omega_{mn}/T}\right). \qquad (91,16)$$

Здесь x_{mn} — матричные элементы шредингеровского оператора $\hat{x}$ по отношению к стационарным состояниям системы; $\omega_{mn}=E_m-E_n$. Сравнение обоих выражений показывает, что

$$\alpha_M(\zeta_s)=\alpha(i\zeta_s), \qquad \zeta_s>0. \qquad (91,17)$$

Поскольку обобщенная восприимчивость $\alpha(\omega)$ вещественна на верхней мнимой полуоси ω, то функция $\alpha_M(\zeta_s)$ вещественна при $\zeta_s>0$. С другой стороны, из (91,16) видно, что $\alpha_M(-\zeta_s)=$ $=\alpha_M^*(\zeta_s)$. Таким образом, $\alpha_M(\zeta_s)$ является четной вещественной функцией ζ_s и выражается через $\alpha(\omega)$ формулой

$$\alpha_M(\zeta_s)=\alpha(i\,|\,\zeta_s\,|). \qquad (91,18)$$

Соотношение (98,18) устанавливает искомую связь. Для определения $\alpha(\omega)$ надо построить функцию, аналитическую в верхней полуплоскости переменной ω, значения которой в дискретных точках $\omega=i\zeta_s$ на верхней мнимой полуоси совпадают с $\alpha_M(\zeta_s)$; это и будет искомая обобщенная восприимчивость.

Описанный метод будет применен в следующей главе к кинетическим свойствам сверхпроводников.

Покажем в заключение, что знание $\alpha(\omega)$ позволяет определить закон релаксации величины x к ее равновесному значению $x=0$. Для этого будем считать, что начальное неравновесное значение x создается обобщенной силой $f(t)$, действующей при $t<0$, а затем выключенной. Значение $x(t)$ в некоторый момент времени t определяется значениями f в течение всего предшествующего времени формулой вида

$$x(t) = \int\limits_{-\infty}^{t} \alpha(t-t') f(t')\, dt',$$

причем функция $\alpha(t)$ связана с обобщенной восприимчивостью обратным преобразованием Фурье

$$\alpha(t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \alpha(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$$

(ср. V, § 123). Если $f=0$ при $t>0$, то

$$x(t) = \int\limits_{-\infty}^{0} \alpha(t-t') f(t')\, dt'.$$

Поведение $x(t)$ при больших t определяется асимптотическим поведением $\alpha(t)$ при $t \to \infty$. В свою очередь последнее определяется ближайшей к вещественной оси особой точкой функции $\alpha(\omega)$ в нижней полуплоскости. В частности, релаксации x по простому экспоненциальному закону $x \sim e^{-t/\tau}$ со временем релаксации τ соответствует наличие у $\alpha(\omega)$ простого полюса при $\omega = -i/\tau$.

§ 92. Гриновские функции неравновесной системы

Задачи физической кинетики всегда связаны с рассмотрением неравновесных состояний. Тем не менее применение описанного в предыдущем параграфе метода позволяет в ряде случаев свести задачи о вычислении кинетических величин к вычислению гриновских функций для термодинамически равновесных систем; тем самым появляется возможность использования такой диаграммной техники (как мацубаровская), которая по самому своему существу применима именно к равновесным состояниям. Естественно, что такая возможность во всяком случае ограничена физическими вопросами, относящимися лишь к слабо неравновесным состояниям.

Мы приступим теперь к построению диаграммной техники, пригодной в принципе для вычисления гриновских функций систем, находящихся в произвольных неравновесных состояниях. Получаемые в этой технике уравнения для гриновских функций по своему смыслу аналогичны кинетическим уравнениям. В применении же к равновесным системам эта же техника позволяет получить гриновские функции и обобщенные восприимчивости