предшествующего времени формулой вида

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

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

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

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

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

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 (при отличных от нуля температурах) как функции сразу от непрерывных вещественных частот, без необходимости в аналитическом продолжении (в этой связи она может оказаться, в сложных случаях, более удобной, чем мацубаровская техника)[1].

Гриновская функция неравновесной системы определяется так же, как и в равновесном случае:

$$iG_{\sigma_1\sigma_2}(X_1,\ X_2)=\langle n|\,\mathrm{T}\hat{\Psi}_{\sigma_1}(X_1)\,\hat{\Psi}^{+}_{\sigma_2}(X_2)\,|n\rangle=$$
$$=\begin{cases}\langle n|\,\hat{\Psi}_{\sigma_1}(X_1)\,\hat{\Psi}^{+}_{\sigma_2}(X_2)\,|n\rangle, & t_1>t_2,\\ \mp\langle n|\,\hat{\Psi}^{+}_{\sigma_2}(X_2)\,\hat{\Psi}_{\sigma_1}(X_1)\,|n\rangle, & t_1<t_2.\end{cases}\tag{92,1}$$

Разница состоит лишь в том, что усреднение (обозначенное символом $\langle n|\ldots|n\rangle$) производится теперь по произвольному квантовому состоянию системы, а не обязательно по стационарному состоянию, как в равновесном случае[2]. Верхний знак (здесь и везде ниже) относится к статистике Ферми, а нижний — к статистике Бозе; в последнем случае (для системы из бесспиновых частиц) спиновые индексы σ_1, σ_2 надо, конечно, опустить. В случае статистики Бозе предполагается, что конденсация отсутствует, т. е. что либо речь идет о системах с несохраняющимся числом частиц (фононы, фотоны), либо система находится при температурах выше точки начала конденсации. В неоднородной неравновесной системе функция (92,1) зависит уже от обеих пар переменных $X_1=(t_1,\ \mathbf{r}_1)$ и $X_2=(t_2,\ \mathbf{r}_2)$ по отдельности, а не только от их разности X_1-X_2, как в равновесном случае.

Диаграммная техника должна дать возможность выразить гриновскую функцию системы взаимодействующих частиц через функции идеального газа. При этом, однако, автоматически возникает необходимость во введении наряду с G еще и других функций. С целью не разбивать дальнейшее изложение, дадим сразу же определение этих функций и выясним некоторые их свойства.

По причинам, которые выяснятся в следующем параграфе, целесообразно обозначить функцию (92,1) как G^{--}; таким образом,

---

[1]) Эта техника принадлежит *Л. В. Келдышу* (1964). Она близка в некоторых отношениях к технике, развитой *Миллсом* (*R. Mills*, 1962) для равновесных состояний.

[2]) В IX, § 36, в определение функции G равновесной системы при $T\neq 0$ включалось также и усреднение по распределению Гиббса. Напомним лишний раз в этой связи, что согласно основным принципам статистики результат статистического усреднения для равновесной системы не зависит от того, производится ли оно по точной волновой функции стационарного состояния замкнутой системы, или с помощью распределения Гиббса для системы в «термостате». Разница состоит лишь в том, что в первом случае результат усреднения будет выражен через энергию и число частиц в системе, а во втором — через температуру и химический потенциал.

запишем это определение в виде[1])

$$iG_{12}^{--}=\langle \mathrm{T}\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_2^+\rangle=\begin{cases}\langle\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_2^+\rangle, & t_1>t_2,\\ \mp\langle\hat{\Psi}_2^+\hat{\Psi}_1\rangle, & t_1<t_2.\end{cases} \tag{92,2}$$

Определение следующей функции,

$$iG_{12}^{++}=\langle \tilde{\mathrm{T}}\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_2^+\rangle=\begin{cases}\mp\langle\hat{\Psi}_2^+\hat{\Psi}_1\rangle, & t_1>t_2,\\ \langle\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_2^+\rangle, & t_1<t_2,\end{cases} \tag{92,3}$$

отличается от (92,2) тем, что вместо T в нем стоит символ $\tilde{\mathrm{T}}$, означающий упорядочение расположения операторных множителей в обратном хронологическом порядке — справа налево в порядке убывания времен.

Еще две функции определяются как средние значения нехронологизированных произведений Ψ-операторов:

$$iG_{12}^{+-}=\langle\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_2^+\rangle,\quad iG_{12}^{-+}=\mp\langle\hat{\Psi}_2^+\hat{\Psi}_1\rangle. \tag{92,4}$$

Разница в знаках в этих определениях для ферми-систем связана с общим правилом — необходимостью изменения знака при перестановке Ψ-операторов.

Отметим, что вторая из функций (92,4) при $t_1=t_2\equiv t$ совпадает с одночастичной матрицей плотности; в полной записи:

$$\mp iG^{-+}(t,\ \mathbf{r}_1;\ t,\ \mathbf{r}_2)=\mathcal{N}\rho(t,\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \tag{92,5}$$

(ср. IX, (7,17), (31,4)); с какой стороны t_2 стремится к пределу t_1 — здесь все равно, так как функция G^{-+} непрерывна при $t_2=t_1$. Значение же функции iG^{+-} при $t_1=t_2$ связано со значением iG^{-+} формулой

$$i\{G^{+-}(t,\ \mathbf{r}_1;\ t,\ \mathbf{r}_2)-G^{-+}(t,\ \mathbf{r}_1;\ t,\ \mathbf{r}_2)\}=\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2), \tag{92,6}$$

следующей из правила коммутации фермиевских или бозевских Ψ-операторов.

Определенные таким образом четыре G-функции не независимы. Они связаны друг с другом линейным соотношением, очевидным непосредственно из их определений:

$$G^{--}+G^{++}=G^{-+}+G^{+-}. \tag{92,7}$$

Функции G^{--} и G^{++} связаны также и соотношением «антиэрмитовой сопряженности» по отношению к перестановке их

[1]) Для уменьшения громоздкости обозначений условимся ниже подразумевать спиновые индексы включенными в условное обозначение переменных X: $X=(t,\ \mathbf{r},\ \sigma)$. Там, где это не может привести к недоразумениям, будем еще больше упрощать обозначения, отмечая значения аргументов X соответствующими индексами: $\Psi_1\equiv\Psi(X_1)$, $G_{12}=G(X_1,\ X_2)$ и т. д. Наконец, условимся писать символ усреднения просто как $\langle\ldots\rangle$ вместо $\langle n|\ldots|n\rangle$.

аргументов:

$$G_{12}^{--} = -G_{21}^{++*}. \tag{92,8}$$

Функции же G^{-+} и G^{+-} «антиэрмитовы» сами по себе:

$$G_{12}^{-+} = -G_{21}^{-+*}, \quad G_{12}^{+-} = -G_{21}^{+-*}. \tag{92,9}$$

Важную роль в дальнейшем будет играть связь этих функций с запаздывающими или опережающими гриновскими функциями. Последние определяются аналогично тому, как это делалось в равновесном случае (ср. IX, § 36):

$$iG_{12}^{R} = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{+} \pm \hat{\Psi}_2^{+} \hat{\Psi}_1 \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2, \end{cases} \tag{92,10}$$

$$iG_{12}^{A} = \begin{cases} 0, & t_1 > t_2, \\ -\langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^{+} \pm \hat{\Psi}_2^{+} \hat{\Psi}_1 \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases}$$

Эти две функции «эрмитово-сопряжены» друг с другом:

$$G_{12}^{A} = G_{21}^{R*}. \tag{92,11}$$

Прямое сравнение определений (92,2—4) и (92,10) дает

$$\begin{aligned} G^{R} &= G^{--} - G^{-+} = G^{+-} - G^{++}, \\ G^{A} &= G^{--} - G^{+-} = G^{-+} - G^{++}. \end{aligned} \tag{91,12}$$

В стационарном, пространственно-однородном случае, когда все функции зависят только от разностей $t = t_1 - t_2$ и $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, они могут быть подвергнуты фурье-разложению по этим переменным. Из (92,8) и (92,11) следуют для фурье-компонент равенства

$$G^{--}(\omega, \mathbf{p}) = -[G^{++}(\omega, \mathbf{p})]^*, \quad G^{A}(\omega, \mathbf{p}) = [G^{R}(\omega, \mathbf{p})]^*, \tag{92,13}$$

а из (92,9) следует, что фурье-компоненты $G^{+-}(\omega, \mathbf{p})$ и $G^{-+}(\omega, \mathbf{p})$ — мнимые.

Для системы невзаимодействующих частиц функция G^{--} удовлетворяет уравнению

$$\hat{G}_{01}^{-1} G_{12}^{(0)--} = \delta(X_1 - X_2), \tag{92,14}$$

где $\hat{G}_0^{-1}$ обозначает дифференциальный оператор

$$\hat{G}_0^{-1} = i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon(-i\nabla) + \mu = i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \tag{92,15}$$

($\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$), а

$$\delta(X_1 - X_2) = \delta_{\sigma_1\sigma_2}\delta(t_1 - t_2)\,\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2); \tag{92,16}$$

индекс (0) у G-функции указывает, что она относится к идеальному газу, а индекс 1 у оператора $\hat{G}_0^{-1}$ — что дифференцирование производится по переменным t_1, $\mathbf{r}_1$. Напомним, что δ-функция в правой стороне уравнения (92,14) связана со скачком, который функция G^{--} испытывает при $t_1=t_2$ [1]). Такой же скачок испытывают функции G^R и G^A, и потому $G^{(0)R}$ и $G^{(0)A}$ удовлетворяют такому же уравнению. Функция же G^{++} имеет при $t_1=t_2$ скачок обратного знака; поэтому

$$\hat{G}_{01}^{-1}G_{12}^{(0)++}=-\delta(X_1-X_2). \tag{92,17}$$

Наконец, функции G^{+-} и G^{-+} непрерывны при $t_1=t_2$; поэтому для идеального газа они удовлетворяют уравнениям [2])

$$\hat{G}_{01}^{-1}G_{12}^{(0)+-}=0, \quad \hat{G}_{01}^{-1}G_{12}^{(0)-+}=0. \tag{92,18}$$

Вычислим все G-функции для стационарного однородного состояния идеального газа, характеризующегося некоторым (не обязательно равновесным) распределением частиц по импульсам $n_{\mathbf{p}}$. Для упрощения формул будем считать, что это распределение не зависит от спина. Тогда спиновая зависимость G-функций (в статистике Ферми) отделяется в виде множителя $\delta_{\sigma_1\sigma_2}$; вместе со спиновыми индексами будем опускать и этот множитель.

Ψ-операторы идеального газа пишем в виде обычных разложений:

$$\hat{\Psi}_0(t, \mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}\exp\{i[\mathbf{pr}-\varepsilon(\mathbf{p})t+\mu t]\} \tag{92,19}$$

и аналогично для $\hat{\Psi}_0^+$ (ср. IX, (9,3)). При подстановке этих выражений в определения G-функций надо помнить, что отличны от нуля диагональные матричные элементы лишь от произведений операторов уничтожения и рождения частиц с одинаковыми $\mathbf{p}$, причем

$$\langle\hat{a}_{\mathbf{p}}^+\hat{a}_{\mathbf{p}}\rangle=n_{\mathbf{p}}, \quad \langle\hat{a}_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}^+\rangle=1\mp n_{\mathbf{p}}.$$

Таким образом, найдем, например,

$$G^{(0)-+}(t, \mathbf{r})=\pm\frac{i}{\mathcal{V}}\int n_{\mathbf{p}}\exp\{i\mathbf{pr}-i\varepsilon(\mathbf{p})t+i\mu t\}\frac{\mathcal{V}d^3p}{(2\pi)^3},$$

---

[1]) См. IX, § 9. Приведенный там вывод уравнения не связан с подразумевавшимся усреднением по основному состоянию системы и остается справедливым при усреднении по любому квантовому состоянию.

[2]) Если дифференцирование производится не по первым, а по вторым переменным в G-функциях, то должен быть изменен знак перед $i\partial/\partial t$, т. е. оператор $\hat{G}_{01}^{-1}$ изменен на $\hat{G}_{02}^{-1*}$:

$$\hat{G}_{02}^{-1*}G_{12}^{(0)--}=\delta(X_1-X_2) \tag{92,14a}$$

и т. п.

где $t=t_1-t_2$, $\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$. Переписав это выражение тождественно в виде

$$G^{(0)-+}(t, \mathbf{r}) = \pm 2\pi i \int n_{\mathbf{p}} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\omega t)\,\delta(\omega - \varepsilon + \mu)\frac{d\omega\, d^3p}{(2\pi)^4},$$

мы видим, что

$$G^{(0)-+}(\omega, \mathbf{p}) = \pm 2\pi i n_{\mathbf{p}} \delta(\omega - \varepsilon + \mu). \tag{92,20}$$

Аналогичным образом найдем

$$G^{(0)+-}(\omega, \mathbf{p}) = -2\pi i (1 \mp n_{\mathbf{p}})\,\delta(\omega - \varepsilon + \mu). \tag{92,21}$$

Для вычисления G^R удобнее всего исходить прямо из уравнения

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon(-i\nabla) + \mu\right] G^{(0)R}(t, \mathbf{r}) = \delta(t)\,\delta(\mathbf{r}),$$

решая его методом Фурье и учтя, что $G^R(\omega, \mathbf{p})$ не должна иметь особенностей в верхней полуплоскости ω. Отсюда сразу находим

$$G^{(0)R}(\omega, \mathbf{p}) = [\omega - \varepsilon(\mathbf{p}) + \mu + i0]^{-1} \tag{92,22}$$

(функция же $G^{(0)A}(\omega, \mathbf{p})$ получается отсюда, согласно (92,13), просто комплексным сопряжением).

Наконец, с помощью (92,12) находим теперь

$$G^{(0)--}(\omega, \mathbf{p}) = [\omega - \varepsilon(\mathbf{p}) + \mu + i0]^{-1} \pm 2\pi i n_{\mathbf{p}} \delta(\omega - \varepsilon + \mu) = \\ = \mathrm{P}\frac{1}{\omega - \varepsilon + \mu} + i\pi(\pm 2n_{\mathbf{p}} - 1)\,\delta(\omega - \varepsilon + \mu). \tag{92,23}$$

Обратим внимание на тот факт, что выражение (92,22) вообще не зависит от свойств состояния (т. е. от распределения $n_{\mathbf{p}}$), по которому производится усреднение. Это свойство функции $G^{(0)R}$ (и $G^{(0)A}$) не связано в действительности с заранее предположенной при выводе (92,22) однородностью и стационарностью состояния системы: функция $G^{(0)R}(X_1, X_2)$ автоматически оказывается зависящей только от разности $X_1 - X_2$.

В применении к равновесной системе, в выражениях (92,21—23) надо понимать под $n_{\mathbf{p}}$ функцию распределения Ферми или Бозе. При этом G-функции окажутся выраженными через T и μ; тем самым будет осуществлен переход от усреднения по заданному стационарному квантовому состоянию к усреднению по распределению Гиббса.

Задача

Найти гриновские функции для однородного стационарного состояния фононного газа в жидкости.

Решение. Аналогично определениям (92,4), имеем для фононного поля:

$$iD_{12}^{+-} = \langle \hat{\rho}_1' \hat{\rho}_2' \rangle, \qquad iD_{12}^{-+} = \langle \hat{\rho}_2' \hat{\rho}_1' \rangle, \tag{1}$$

где $\hat{\rho}' = \hat{\rho}'^+$ — оператор переменной части плотности среды. Ввиду самосопряженности этого оператора, функции (1) связаны соотношением

$$D_{12}^{+-} = D_{21}^{-+} \tag{2}$$

(и, конечно, по-прежнему обладают свойством (92,9)).

Для газа невзаимодействующих фононов (см. IX, (24,10))

$$\hat{\rho}' = \hat{\rho}'^+ = \sum_{\mathbf{k}} i \left(\frac{\rho_0 k}{2u\mathcal{V}}\right)^{1/2} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{kr}-ukt)} - \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(\mathbf{kr}-ukt)}\right) \tag{3}$$

(ρ_0 — невозмущенная плотность, u — скорость звука). Подставив (3) в (1) и перейдя от суммирования к интегрированию, имеем

$$iD^{(0)-+}(t, \mathbf{r}) = \frac{\rho_0}{2u} \int \left\{\langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}} \rangle e^{i(\mathbf{kr}-ukt)} + \langle \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \rangle e^{-i(\mathbf{kr}-ukt)}\right\} \frac{k\, d^3k}{(2\pi)^3},$$

или, заменив во втором члене переменную интегрирования $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$ и выразив средние значения через числа заполнения фононных состояний $N_{\mathbf{k}}$,

$$iD^{(0)-+}(t, \mathbf{r}) = \int \frac{\rho_0 k}{2u} \left\{N_{\mathbf{k}} e^{-iukt} + (1 + N_{-\mathbf{k}}) e^{iukt}\right\} e^{i\mathbf{kr}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}.$$

Подынтегральное выражение (без множителя $e^{i\mathbf{kr}}$) есть уже компонента фурье-разложения по координатам. Разложив также и по времени, получим

$$iD^{(0)-+}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\pi\rho_0 k}{2} \left\{N_{\mathbf{k}} \delta(\omega - uk) + (1 + N_{-\mathbf{k}}) \delta(\omega + uk)\right\}. \tag{4}$$

Для функции же $D^{(0)+-}$ имеем, согласно (2):

$$D^{(0)+-}(\omega, \mathbf{k}) = D^{(0)-+}(-\omega, -\mathbf{k}). \tag{5}$$

Еще две гриновские функции определяются как

$$iD_{12}^{--} = \langle \mathrm{T} \hat{\rho}_1' \hat{\rho}_2' \rangle, \qquad iD_{12}^{++} = \langle \tilde{\mathrm{T}} \hat{\rho}_1' \hat{\rho}_2' \rangle. \tag{6}$$

При этом

$$D_{12}^{--} = D_{21}^{--}, \qquad D_{12}^{++} = D_{21}^{++}. \tag{7}$$

Для невзаимодействующих фононов аналогичное вычисление дает (ср. задачу в IX, § 31)

$$D^{(0)--}(\omega, \mathbf{k}) = -[D^{(0)++}(\omega, \mathbf{k})]^* =$$
$$= \frac{\rho_0 k}{2u} \left[\frac{1}{\omega - uk + i0} - \frac{1}{\omega + uk - i0}\right] - 2\pi i \left[N_{\mathbf{k}} \delta(\omega - uk) + N_{-\mathbf{k}} \delta(\omega + uk)\right]. \tag{8}$$

В согласии с (7), $D^{(0)--}(\omega, \mathbf{k}) = D^{(0)--}(-\omega, -\mathbf{k})$.

Из (8) следует, что в координатном представлении функция $D^{(0)--}(t, \mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - u^2 \Delta\right) D^{(0)--}(t, \mathbf{r}) = \rho_0 \delta(t) \Delta\delta(\mathbf{r}), \tag{9}$$

заменяющему уравнение (92,14) для гриновских функций обычных частиц.

§ 93. Диаграммная техника для неравновесных систем

Всякая диаграммная техника основана на выделении из гамильтониана системы оператора взаимодействия: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где $\hat{H}_0$ — гамильтониан системы невзаимодействующих частиц. Диаграммная техника есть теория возмущений по $\hat{V}$.