

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

О диаграммной технике для неравновесных систем: вывод, некоторые особенности и некоторые применения

П.И. Арсеев

Изложена логика появления диаграммной техники для неравновесных процессов (диаграммной техники Келдыша). На простых примерах показано, как проводятся вычисления в рамках этой техники, с какими трудностями можно при этом столкнуться и как их можно разрешить. Помимо общеизвестных сведений, мы постараемся обсудить некоторые детали, которым редко уделяют внимание в литературе. В частности, мы разберём вопрос о том, есть ли необходимость в использовании так называемой трёхкомпонентной техники. Приведены примеры ряда применений неравновесной диаграммной техники (НДТ) к описанию туннельных систем, в задачах линейного отклика и т.д. Надеемся, что какие-то части обзора будут полезны и для людей, достаточно хорошо знакомых с диаграммной техникой для неравновесных процессов.

Ключевые слова: диаграммная техника, неравновесная диаграммная техника, диаграммная техника Келдыша, неравновесные процессы, квантовая кинетика

PACS numbers: 03.70.+k, 05.60.Gg, 11.10.Wx, 72.10.Bg

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201512b.1271

Содержание

1. Введение (1271).
2. Основные идеи неравновесной диаграммной техники (1272).
3. Правила неравновесной диаграммной техники (1276).
4. Матричные уравнения Дайсона. Различные матричные формулировки неравновесной диаграммной техники (1278).
5. Квантовые кинетические уравнения (1284).
6. Простой пример как полигон для изучения особенностей неравновесной диаграммной техники (1286).
7. Нужна ли трёхкомпонентная техника как обобщение неравновесной диаграммной техники? (1289).
8. Теория отклика в рамках неравновесной диаграммной техники (1294).
 - 8.1. Калибровочно-инвариантные функции отклика сверхпроводника.
9. Туннельные системы (1297).
 - 9.1. Общие формулы для туннельного тока.
 - 9.2. Флуктуации (шумы) туннельного тока.
 - 9.3. Возбуждение колебаний туннельным током.
 - 9.4. Туннельные задачи в подходе эффективной массы.
 - 9.5. Термозмиссия.
 - 9.6. Теплопроводность и термоэффекты.
10. Взаимодействие сильного электромагнитного поля с электронами в полупроводниках (1308).
11. Метод вспомогательных частиц в неравновесной диаграммной технике (1309).

12. Некоторые другие приложения (1315).

12.1. Неупорядоченные системы. 12.2. Физика элементарных частиц и космология.

13. Заключение (1316).

14. Приложение. Теорема Вика для неравновесной диаграммной техники и техника с начальными корреляциями (1317).

Список литературы (1320).

1. Введение

История неравновесной диаграммной техники (НДТ) началась 50 лет назад с работы Л.В. Келдыша [1], вышедшей в 1964 г. на русском языке в *Журнале экспериментальной и теоретической физики (ЖЭТФ)* и в 1965 г. на английском языке в переводной версии *ЖЭТФ (Soviet Physics—JETP)*. Хотя, безусловно, существовали работы, которые подготовили появление данной статьи, всё-таки только в работе [1] впервые были сформулированы те простые правила, которые и составляют суть диаграммной техники для неравновесных процессов. Более того, именно в этой работе было впервые показано, что такие простые правила существуют — то, что раньше представлялось неочевидным.

Статья [1] имеет странную историю. С одной стороны, её сразу заметили и, в общем, оценили. С другой стороны, привычка использовать температурную диаграммную технику в физике конденсированного состояния оказалась столь сильна, что многие задачи, решавшиеся гораздо проще и естественней в рамках НДТ, продолжали (и продолжают) рассматриваться в температурной технике. Для того чтобы сделать температурную технику работоспособной, во многих случаях приходилось демонстрировать большую изобретательность,

П.И. Арсеев. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
Ленинский просп. 53, 119991 Москва, Российская Федерация
E-mail: ars@lpi.ru

Статья поступила 4 августа 2015 г.,
после доработки 11 октября 2015 г.

как, например, с предложенной Элиашбергом процедурой аналитического продолжения [2]. Почему-то появляющееся в НДТ удвоение переменных рассматривалось как ненужная сложность, хотя на самом деле вычисления в рамках НДТ обладают часто большей простотой и ясностью.

В ряде случаев температурная техника применялась там, где она в принципе работать правильно не может — например, при рассмотрении туннельных контактов. (Не надо обольщаться тем, что для простых случаев можно добиться правильного ответа и в температурной технике.) Хотя ещё в 1971 г. были написаны прекрасные работы Кароли, Комбеско, Нозьера и Сент-Джеймса [3–5], в которых в рамках НДТ была последовательно рассмотрена задача о туннелировании через промежуточную систему со взаимодействием с фононами в подходе сильной связи, в дальнейшем опять очень часто использовался язык температурной техники, который в принципе не позволяет адекватно рассматривать системы со взаимодействием в области неравновесного тока. И только после появления статьи [6] (понадобилось почти 30 лет, чтобы признать, что в этой области естественно применять НДТ!) НДТ начала всё шире применяться в таких задачах. Теперь применение техники Келдыша в теории твердотельных гетероструктур стало общеупотребительным.

Большой круг задач, в которых также применялась НДТ, относится к области взаимодействия света большой интенсивности с полупроводниками, описанию лазерной генерации в полупроводниковых структурах, в том числе построению теории каскадных лазеров (много результатов собрано в книге [7], ряд ссылок дан в разделе 10). Падающая на систему волна большой интенсивности создаёт большую плотность неравновесных электронов и дырок, которые рассеиваются на примесях, взаимодействуют друг с другом и с фононами, рекомбинируют с излучением света. Описание нестационарных и сильно неравновесных состояний в таких системах — задача как раз для НДТ.

В последние годы эта техника начала понемногу применяться также и в таких областях, как космология, столкновения тяжёлых ионов, и в некоторых других задачах физики элементарных частиц (ядерной физике).

Исторически первой была создана диаграммная техника Фейнмана–Дайсона [8, 9], обладавшая необычайной ясностью и простотой (перевод основополагающих статей есть в сборнике [10]). Однако эта "квантовополевая" техника была основана на усреднении всех величин по вакууму (и была в дальнейшем обобщена в теории твёрдого тела на случай нулевой температуры и усреднения по основному состоянию всей многочастичной системы). В 1955 г. Мацубара предложил свой вариант диаграммной техники для многочастичных систем [11], находящихся в термодинамическом равновесии. Благодаря усилиям многих теоретиков (см., например, [2, 12–15]) были разработаны технические методы, позволившие сделать применение температурной техники эффективным.

Однако эта техника не позволяет непосредственно находить пропагаторы системы (функции Грина) в реальном времени. Для вычислений в реальном времени в первой работе Миллса [16] были сделаны шаги в нужном направлении — рассмотрены временные пропагаторы, но только для термодинамически равновесного состоя-

ния. Условие термодинамического равновесия позволяло использовать спектральные разложения и методы аналитического продолжения для построения схемы вычисления временных пропагаторов.

Однако проблема описания в реальном времени систем не в основном (в неравновесном) состоянии представлялась очень сложной. Это мнение было основано на том, что любые техники для вычисления запаздывающих корреляторов, лежащих обычно в основе описания неравновесного отклика систем, получались сложными и громоздкими.

Заслуга появившейся 50 лет назад статьи [1] в том, что было показано, что дело обстоит гораздо проще, чем это представлялось большинству теоретиков в то время. Сам автор так формулирует побудительные причины своей работы (доклад на Междисциплинарном семинаре "Прогресс в неравновесных функциях Грина" 19 августа 2002 г., Дрезден, Германия [17]): "Фейнмановская диаграммная техника представлялась мне настолько логичной и естественной, что я не мог поверить, что её применимость ограничена только хоть и важными, но очень специальными классами состояний — основным состоянием или термодинамическим равновесием. Так что программа действий была наиболее простой и непосредственной (прямолинейной): повторить шаг за шагом оригинальный вывод Фейнмана–Дайсона, проверяя, на каком шаге она станет неправильной для произвольного состояния, а затем попытаться обойти возникающие трудности, следуя как можно ближе к оригинальной формулировке".

В этом же докладе Келдыш объясняет, насколько много уже было сделано к моменту создания НДТ в области применения концепций и методов теории поля, включая функции Грина, к проблеме многих частиц, в том числе и в Советском Союзе [18–21]. НДТ возникла в каком-то смысле как необходимое расширение этой области. Часть работ, которые "помогли" созданию НДТ, ещё будут упомянуты по ходу изложения.

Температурная диаграммная техника на первый взгляд выглядит проще НДТ, и этим объясняются частые попытки ограничиться в применениях только ею. Однако за простоту её формулировки приходится платить довольно сложными вычислениями в любых нетривиальных случаях (и ограничиваться случаем термодинамического равновесия и теорией отклика). НДТ, будучи двухкомпонентной теорией, кажется более сложной, но делает более ясными и простыми вычисления в сложных системах (позволяя рассматривать и неравновесную и нестационарную ситуации). Мы постараемся показать, что и вывод, и правила работы с НДТ являются, по-сути, не более сложными, чем в температурной технике. После краткого вывода исходных формул НДТ на простых примерах обсудим те принципы и тонкости в НДТ, о которых обычно не говорится в обзорах. Чтобы показать, как работает НДТ, будет рассмотрен ряд задач из области физики твёрдого тела. В конце будут упомянуты некоторые другие приложения техники Келдыша.

2. Основные идеи неравновесной диаграммной техники

Мы кратко повторим здесь совершенно элементарные сведения из квантовой механики (статистики), однако это представляется необходимым, чтобы показать логику

возникновения того подхода, который использовал Келдыш в своей работе. Поскольку задачей неравновесной диаграммной техники является вычисление изменений, происходящих в квантовой системе с течением времени под действием каких-либо возмущений, её построение начинается с общего описания эволюции в квантовой механике. Основой для такого описания всегда является уравнение Шрёдингера, приводящее к известной всем формуле для вычисления значения любой физической величины I в момент времени t :

$$I(t) = \langle \Psi(t) | \hat{I} | \Psi(t) \rangle = \langle 0 | S(t_0, t) \hat{I} S(t, t_0) | 0 \rangle, \quad (1)$$

где матрица (оператор) эволюции, собственно, и определяется уравнением Шрёдингера:

$$i \frac{\partial}{\partial t} S(t, t_0) = H S(t, t_0), \quad S(t_0, t_0) = 1. \quad (2)$$

В многочастичной системе мы имеем дело с квантовой статистикой, поэтому вместо эволюции чистой системы появляется эволюция системы, описываемой матрицей плотности. Все физические величины могут быть вычислены, если известна матрица плотности в момент времени t

$$I(t) = \langle \hat{I} \rangle \equiv \text{Sp} [\hat{\rho}(t) \hat{I}], \quad (3)$$

а изменение во времени матрицы плотности определяется тем же оператором эволюции:

$$\rho(t) = S(t, t_0) \rho(t_0) S^+(t, t_0). \quad (4)$$

Любая диаграммная техника возникает в том случае, когда операторы эволюции не могут быть найдены явным образом и их приходится вычислять по теории возмущений в виде ряда по некоторому возмущению. Предполагается, что гамильтониан системы может быть разбит на гамильтониан исходной, невозмущённой, системы и оператор возмущения:

$$H = H_0 + V. \quad (5)$$

Важно, чтобы для невозмущённой системы мы знали все решения. При этом в гамильтониан H_0 могут входить и некоторые внешние поля, надо только, чтобы мы могли явным образом вычислять любые средние с матрицей плотности невозмущённой системы. В оператор возмущения могут входить как внешние поля, так и взаимодействие между различными частицами в системе. Такую теорию возмущений удобнее строить в гейзенберговском представлении, особенно если нас интересует не только значение какой-либо физической величины в данный момент времени, но и временные корреляционные функции физических величин. Для случая одного оператора

$$\begin{aligned} \langle \hat{I} \rangle &= \text{Sp} [S(t, t_0) \rho(t_0) S^+(t, t_0) \hat{I}] = \\ &= \text{Sp} [\rho(t_0) S^+(t, t_0) \hat{I} S(t, t_0)], \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{Sp} [\hat{\rho}(t) \hat{I}] &= \text{Sp} [\rho_0 S^+(t, t_0) \hat{I} S(t, t_0)] = \\ &= \text{Sp} [\rho_0 U^+(t, t_0) \hat{I}(t) U(t, t_0)], \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\hat{I}(t) = \exp(iH_0 t) \hat{I} \exp(-iH_0 t), \quad (8)$$

$$U(t, t_0) = \exp(iH_0 t) S(t, t_0). \quad (9)$$

Если бы оператор возмущения коммутировал с исходным гамильтонианом H_0 , то оператор эволюции в представлении взаимодействия находился бы тривиально:

$$U(t, t_0) = \exp[-iV(t - t_0)]. \quad (10)$$

Однако во всех обычных случаях это не так, и для вычисления оператора U используется уравнение

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \hat{V}(t) U(t, t_0), \quad (11)$$

в котором все операторы записаны в представлении взаимодействия:

$$\hat{V}(t) = \exp(iH_0 t) \hat{V} \exp(-iH_0 t). \quad (12)$$

Решение уравнения (11) из-за некоммутативности операторов $\hat{V}$ и H_0 записывают в виде так называемой T -упорядоченной экспоненты:

$$U(t, t_0) = T \exp \left[-i \int_{t_0}^t \hat{V}(t') dt' \right]. \quad (13)$$

Оператор упорядочения по времени (T -упорядочение), действуя на любой набор операторов (гейзенберговских или в представлении взаимодействия), расставляет их справа налево по мере увеличения времени этих операторов:

$$T \hat{A}(t) \hat{B}(t') = \theta(t - t') \hat{A}(t) \hat{B}(t') \mp \theta(t' - t) \hat{B}(t') \hat{A}(t), \quad (14)$$

при этом перестановка местами двух фермионных операторов, как обычно, приводит к изменению знака (верхний знак в этой формуле). Оператор (13) представляется в виде ряда:

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= 1 - i \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 + \\ &+ i^2 \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}(t_2) dt_2 + \dots, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}(t_2) dt_2 = \frac{1}{2} T \left[\int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^t \hat{V}(t_2) dt_2 \right]. \quad (16)$$

Обратный оператор

$$-i \frac{\partial}{\partial t} U^+(t, t_0) = U^+(t, t_0) \hat{V}(t) \quad (17)$$

определяется с помощью операции обратного упорядочения по времени, когда операторы с более поздним временем стоят правее:

$$\begin{aligned} U^+(t, t_0) &= 1 + i \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 + \\ &+ i^2 \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) + \dots, \end{aligned} \quad (18)$$

$$U^+(t, t_0) = \tilde{T} \exp \left[+i \int_{t_0}^t \hat{V}(t') dt' \right]. \quad (19)$$

Во многих случаях нас интересуют корреляторы каких-либо физических величин. Кроме того, как известно, много физической информации содержится в функциях Грина, которые тоже являются простейшими корреляторами. Простой коррелятор двух операторов даётся выражением:

$$\langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle = \text{Sp} [\rho_0 S^+(t, t_0) \hat{A} S(t, t') \hat{B} S(t', t_0)]. \quad (20)$$

А коррелятор, представляющий собой среднее от двух T -упорядоченных операторов, может быть записан компактнее благодаря свойству операторов эволюции:

$$S(t, t_0) = S(t, t_1) S(t_1, t_0). \quad (21)$$

Тогда матрицы эволюции и сами усредняемые операторы можно поставить под единым T -упорядочением

$$\langle T \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle = \text{Sp} [\rho_0 U^+(t, t_0) T \{ U(t, t_0) \hat{A}(t) \hat{B}(t') \}]. \quad (22)$$

Таким образом, ответ для средних всегда имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left[\rho_0 \tilde{T} \exp \left[+i \int_{t_0}^t \hat{V}(t'_2) dt'_2 \right] \times \right. \\ & \left. \times T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^t \hat{V}(t'_1) dt'_1 \right] \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right\} \right]. \quad (23) \end{aligned}$$

Формулы типа (23) решают следующую задачу. Известно, что в начальный момент времени t_0 система описывается матрицей плотности ρ_0 , которая позволяет вычислить средние значения любых величин. Начинает действовать взаимодействие V , изменяющее матрицу плотности и не позволяющее проводить вычисления средних точно. Формула (23) позволяет найти изменение любых величин с течением времени по теории возмущений, если разложить экспоненты в ряд.

В обычной "полевой" технике (применение к задачам теории многих частиц изложено в работе [21]) все средние берутся по основному состоянию (вакууму). При этом действие первого множителя в (23) сводится только к появлению некоторого фазового множителя. Для состояний, описываемых произвольной матрицей плотности, такую факторизацию сделать невозможно, и это представлялось долгое время препятствием для упрощения вычислений в реальном времени. Тем не менее в работе [1] было показано, что простые правила, позволяющие автоматическим образом достаточно компактно строить ряд теории возмущений на основе формул типа (23), существуют. Эти правила и составляют диаграммную технику для неравновесных систем.

В выражении (23) группы операторов стоят в определённом порядке. В частности, все операторы из "обратной" матрицы эволюции U^+ всегда стоят левее ("после", если отслеживать действие операторов последовательно справа налево) всех операторов под обычным T -упорядочением.

Можно приписать всем временам в этом операторе индекс "+", а временам в операторах под знаком обычного T -упорядочения — индекс "-". Тогда правила расстановки операторов можно сделать наглядными,

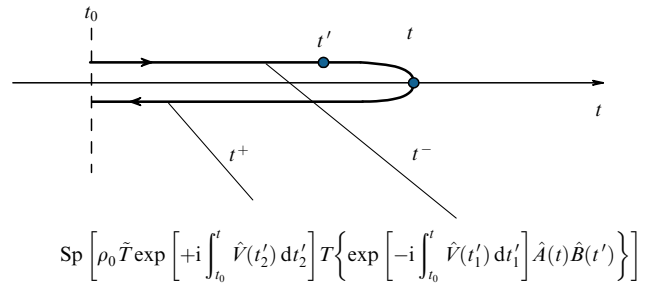


Рис. 1. Контур Келдыша.

если нарисовать такой контур, как показано на рис. 1, и считать, что на "верхней" части контура находятся времена с индексом "-", а на "нижней" — с индексом "+". Движение по такому контуру начинается с начального момента времени t_0 , идёт по "верхней" части контура до максимального времени t усредняемых операторов и возвращается по "нижней" части снова до t_0 . Если ввести операцию T_C -упорядочения вдоль такого контура, то получится, что на "верхней" части для операторов из U действует обычное T -упорядочение, на "нижней" — операторы из U^+ будут "анти" T -упорядочиваться, так как направление движения по этой части контура происходит от времени t к t_0 в обратную сторону. При этом все операторы из U^+ будут всегда стоять позже операторов из U , как это и должно быть в формуле (23).

Таким образом, понятие T_C -упорядочения вдоль такого контура позволяет записать выражение (23) в совсем компактной форме:

$$\text{Sp} \left[\rho_0 T_C \left\{ \exp \left[-i \int_C \hat{V}(t_c) dt_c \right] \hat{A}(t^-) \hat{B}(t'^-) \right\} \right] \quad (24)$$

(с учётом того, что вдоль "нижней" ветви:

$$U^+(t, t_0) = \tilde{T} \exp \left[-i \int_t^{t_0} \hat{V}(t') dt' \right].$$

Заметим, что слова "верхняя", "нижняя" части контура не зря взяты в кавычки. На самом деле интегрирование и по той, и по другой части происходит строго вдоль действительной оси времени, контур изображается в виде петли только для наглядности. Никакого выхода в "комплексную плоскость времени" не происходит. Мы ещё вернёмся к этому вопросу в связи с обсуждением "трёхкомпонентной" техники.

Мы традиционно начали с вычисления T -упорядоченного значения двух операторов. В случае, если мы хотим вычислить обычный коррелятор (то, что в теории поля называют функциями Вайтмана (Wightman)), в котором порядок операторов жёстко задан, можно легко обобщить формулу (24). Например, пусть нас интересует такой коррелятор двух операторов, в котором время t может быть как больше, так и меньше t' :

$$\langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle = \text{Sp} [\rho_0 S^+(t, t_0) \hat{A} S(t, t') \hat{B} S(t', t_0)]. \quad (25)$$

Достаточно приписать аргументу оператора A индекс t^+ , а аргументу оператора B — индекс t^- , и общая операция T_C -упорядочения всегда будет ставить оператор B впереди оператора A , а части матрицы эволюции будут компоноваться соответствующим образом. При

$t > t'$

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle &= \text{Sp} [\rho_0 U^+(t, t_0) \hat{A}(t) U(t, t') \hat{B}(t') U(t', t_0)] = \\ &= \text{Sp} \left[\rho_0 \tilde{T} \exp \left[+i \int_{t_0}^t \hat{V}(t'_2) dt'_2 \right] \hat{A}(t) \times \right. \\ &\quad \left. \times T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^{t'} \hat{V}(t'_1) dt'_1 \right] \hat{B}(t') \right\} \right], \end{aligned} \quad (26)$$

при $t' > t$

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle &= \text{Sp} [\rho_0 U^+(t, t_0) \hat{A}(t) U^+(t', t) \hat{B}(t') U(t', t_0)] = \\ &= \text{Sp} \left[\rho_0 \tilde{T} \exp \left[+i \int_{t_0}^t \hat{V}(t'_2) dt'_2 \right] \hat{A}(t) \tilde{T} \exp \left[+i \int_t^{t'} \hat{V}(t'_3) dt'_3 \right] \times \right. \\ &\quad \left. \times T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^{t'} \hat{V}(t'_1) dt'_1 \right] \hat{B}(t') \right\} \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

И в том и в другом случае результат опять записывается в общем виде:

$$\text{Sp} \left[\rho_0 T_C \left\{ \exp \left[-i \int_C \hat{V}(t_c) dt_c \right] \hat{A}(t^+) \hat{B}(t'^-) \right\} \right]. \quad (28)$$

Надо понимать, что "+" и "-", приписанные временам в операторах или самим операторам, — это просто напоминание о том, из какого оператора эволюции (прямого или обратного) эти операторы появились и в каком порядке они должны стоять под знаком усреднения относительно друг друга. В этом месте и возникает два набора переменных: один из матрицы прямой эволюции, другой из матрицы S^+ "обратной" эволюции. И эти переменные всегда упорядочены определённым образом относительно друг друга. Мы видим, что такая структура с двумя "типами" операторов всегда естественным образом возникает при вычислении в квантовой механике изменения во времени любых величин. Неудивительно, что и в работе Швингера [22], всегда упоминающейся в качестве предшественника работы [1], появлялись матричные уравнения эволюции. Однако Швингер пользовался уравнениями движения, возникающими в его технике функционального дифференцирования, что позволило ему понять правильную структуру уравнений, становящихся теперь матричными уравнениями (2×2), но диаграммной техники в работах Швингера создано не было.

Формула (24) сама по себе ещё не решает задачу построения диаграммной техники. Дальше возникает вопрос, можно ли "автоматизировать" вычисления средних от произведения большого числа операторов, которые появляются при разложении T -экспоненты в ряд:

$$\begin{aligned} \text{Sp} \left\{ \rho_0 \tilde{T} \left[\frac{i^n}{n!} \int \int \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) dt_1 dt_2 \dots dt_n \right] \times \right. \\ \left. \times T \left[\hat{A}(t) \hat{B}(t') \frac{(-i)^m}{m!} \int \int \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_m) dt_1 dt_2 \dots dt_m \right] \right\}. \end{aligned} \quad (29)$$

В обычной технике теорема Вика [27] позволяет доказать, что такие T -произведения большого числа операторов рождения и уничтожения распадаются на попарные средние. Справедливость теоремы Вика в данном случае не является очевидной.

Пожалуй, понимание того, что при вычислениях по теории возмущений не только обычные (T -упорядо-

ченные) функции Грина, но и любые корреляторы в реальном времени могут быть записаны в виде общего T_C -упорядочения по специальному контуру, а также то, что такое обобщение T -упорядочения не является препятствием для применения общих правил построения диаграммной техники, и является одним из основных достижений работы [1]¹.

Хотелось бы ещё раз подчеркнуть: то, что теорема Вика в модифицированном виде выполняется и для случая неравновесных состояний, является нетривиальным фактом. Об этом говорится в первой статье [1], но полного доказательства этому факту там не приводилось. В многочисленных обзорах, как правило, говорится об этом как о чём-то само собой разумеющемся. То, что называется доказательством теоремы Вика в термодинамическом пределе, является традиционной глупостью (к сожалению, попавшей даже в хорошие учебники по теории конденсированного состояния). Согласно этому "доказательству", в любом порядке теории возмущений пара операторов рождения и уничтожения, относящихся к определённому состоянию, должна встречаться только один раз, т.е. усреднение проводится тривиально — независимо усредняются пары операторов, которые все относятся к разным состояниям. Тем самым для любого возмущения учитывается только однократное воздействие этого возмущения на частицы в любом состоянии. Если бы, к несчастью, в физике многих частиц теорема Вика осуществлялась только таким образом, нельзя было бы диаграммными методами рассматривать любые задачи с примесными состояниями (например, модель Андерсона), задачи о поляритонах с многократным переизлучением атомом фотона и многие другие, в которых данное электронное состояние испытывает многократное воздействие возмущения.

Чтобы не загромождать здесь изложение, мы покажем в Приложении, что понятие T_C -упорядочения не только делает простыми и компактными выражения типа (24), но и позволяет обобщить теорему Вика на неравновесный случай. Кроме того, из этого вывода сразу же видно, что происходит, если в системе в начальный момент существовали корреляции между частицами в разных состояниях. Такое обобщение неравновесной диаграммной техники на системы с начальными корреляциями было сделано в работе Холла [25] и потом существенно развито в работе Кухаренко и Ти-ходеева [26].

Таким образом, второй шаг после введения понятия T_C -упорядочения, приводящий к появлению диаграммной техники — это обобщение теоремы Вика, которое звучит так: среднее от T_C -упорядоченного произведения операторов равно сумме всех возможных разбиений этого произведения на попарные T_C -упорядоченные

¹ Заметим, что в работе Крейга [23], опубликованной в 1968 г., через 4 года после статьи Келдыша, повторено построение диаграммной техники с использованием обобщённого понятия T -упорядочения вдоль контура вокруг действительной оси. В этой статье есть примечание, что *некоторые части данной техники были получены независимо и в работе [1]*. Удивительно, но в книге Р. Миллса 1969 года [24] уже есть изложение такой техники на основе работы Крейга, но нет ссылки на пионерскую работу [1]. При этом и в работе [23], и в работе [24] речь идёт о вычислении временных пропагаторов только в термодинамически равновесном состоянии. Возможность применения этой техники для описания неравновесных и нестационарных состояний совсем не обсуждается (видимо, осталась непонятой).

средние. Для фермионов, как обычно, есть правило, что знак каждого разбиения зависит от чётности перестановки ферми-операторов, когда мы группируем их парно.

3. Правила неравновесной диаграммной техники

Любой гамильтониан возмущения V представляет собой на языке вторичного квантования набор операторов рождения и уничтожения различных частиц. Так, для взаимодействия бозонов или фермионов с внешним полем (заданным скалярным потенциалом) оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V} = \int \Psi^+(r) U(r, t) \Psi(r) = \sum_{p, q} a_{p+q}^+ a_p U_q(t). \quad (30)$$

Для парного взаимодействия между частицами

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \int \Psi^+(r_1) \Psi^+(r_2) U(r_1 - r_2) \Psi(r_2) \Psi(r_1) dr_1 dr_2 = \\ &= \sum_{p, p', q} a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ U(q) a_{p'} a_p, \end{aligned} \quad (31)$$

для взаимодействия электронов с фононами:

$$\hat{V} = \sum_{p, q} g_{p, q} a_{p+q}^+ a_p (b_{-q}^+ + b_q), \quad (32)$$

где b_q — оператор уничтожения фонона.

Базовыми элементами диаграммной техники являются попарные средние от операторов рождения и уничтожения, появляющиеся в операторах возмущения. Поэтому дальше мы будем говорить об общих формулах (24), в которых произвольные операторы A и B являются операторами рождения и уничтожения частиц в каких-то состояниях

$$\hat{A} = a_p, \quad \hat{B} = a_{p'}^+. \quad (33)$$

Если для обычной диаграммной техники появляется один базовый элемент — обычное T -упорядоченное среднее от двух операторов (одного оператора рождения и одного уничтожения) в представлении взаимодействия, то теперь ситуация немного усложняется, так как базовыми элементами становятся парные средние от всех возможных комбинаций T_C -упорядочения двух операторов. Заметим, что в исходном доказательстве теоремы Вика [27] общий результат формулируется для всех возможных пар операторов рождения и уничтожения частиц, однако, как и в обычном случае, ненулевые средние возникают только для пары операторов a и a^+ . (Случай сверхпроводимости, когда появляются аномальные средние от двух операторов рождения или уничтожения, мы рассмотрим в разделе 8.1.)

Поскольку на контуре C временные аргументы операторов могут лежать либо на "верхней", либо на "нижней" части контура, то общее определение функции Грина как среднего от T_C -упорядоченной пары операторов:

$$\hat{G}(r, t^\alpha; r' t'^\beta) = -i \langle T_C \Psi(\mathbf{r}, t^\alpha) \Psi^+(\mathbf{r}', t'^\beta) \rangle = \hat{G}^{\alpha, \beta}(r, t; r', t') \quad (34)$$

на самом деле означает появление четырёх различных функций от действительной переменной времени $t - t'$ ($\alpha, \beta = +, -$). Для невзаимодействующих частиц прямое вычисление таких функций Грина в импульсном представлении даёт:

$$\hat{a}_p^+(t) = \exp(i\varepsilon_p t) \hat{a}_p^+, \quad \hat{a}_p(t) = \exp(-i\varepsilon_p t) \hat{a}_p, \quad (35)$$

$$\Psi(r, t) = \sum_p \hat{a}_p(t) \exp(ipr), \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \hat{G}_p^{--}(t, t') &= -i \langle T_C \hat{a}_p(t^-) \hat{a}_p^+(t'^-) \rangle = -i \langle T \hat{a}_p(t) \hat{a}_p^+(t') \rangle = \\ &= -i [\theta(t - t') \pm n_p] \exp[-i\varepsilon_p(t - t')], \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \hat{G}_p^{++}(t, t') &= -i \langle \tilde{T} \hat{a}_p(t) \hat{a}_p^+(t') \rangle = \\ &= -i [\theta(t' - t) \pm n_p] \exp[-i\varepsilon_p(t - t')], \end{aligned} \quad (38)$$

$$\hat{G}_p^{+-}(t, t') = -i \langle \hat{a}_p(t) \hat{a}_p^+(t') \rangle = -i(1 \pm n_p) \exp[-i\varepsilon_p(t - t')], \quad (39)$$

$$\hat{G}_p^{-+}(t, t') = \mp i \langle \hat{a}_p^+(t') \hat{a}_p(t) \rangle = \mp i n_p \exp[-i\varepsilon_p(t - t')]. \quad (40)$$

Верхний знак в этих выражениях относится к бозонам, а нижний — к фермионам.

Из определения (34) следует, что между такими четырьмя функциями Грина существует соотношение:

$$\hat{G}^{-+} + \hat{G}^{+-} = \hat{G}^{--} + \hat{G}^{++}, \quad (41)$$

которому, естественно, удовлетворяют и функции Грина невзаимодействующих частиц (37)–(40).

Хочется подчеркнуть, что набор из четырёх функций можно определить и не вводя операцию T_C -упорядочения (например, в курсе Ландау–Лифшица–Питаевского [28] так и сделано), однако нам кажется, что введение T_C -упорядочения делает картину более логичной и единообразной, в частности, доказывать теорему Вика без этого значительно труднее. В такой картине функция, которая определена без всякого обычного T -упорядочения, например,

$$G^{+-}(rt, r't') = -i \langle \hat{\Psi}(rt) \hat{\Psi}^+(r't') \rangle, \quad (42)$$

на самом деле строится по общему определению T_C -упорядочения:

$$G^{+-}(rt, r't') = -i \langle T_C \hat{\Psi}(rt^+) \hat{\Psi}^+(r't'^-) \rangle, \quad (43)$$

просто времена t^+ всегда лежат "после" времён t^- с точки зрения контура C , поэтому оператор Ψ всегда будет стоять слева от оператора Ψ^+ , каково бы ни было соотношение между временами t, t' на действительной оси.

Появившиеся в формулах (37)–(40) числа заполнения состояний n_p не обязательно должны быть фермиевскими или бозевскими распределениями $n(\varepsilon_p)$. Как следует из Приложения, в начальной матрице плотности должны только отсутствовать корреляции между различными состояниями. Гиббсовская матрица плотности, соответствующая термодинамическому распределению для невзаимодействующих частиц, удовлетворяет этому требованию, однако на самом деле начальные числа заполнения могут быть любыми.

В большом количестве задач нас интересует изменение заполнения определённых состояний (или концент-



Рис. 2. Диаграммы первого порядка для случая внешнего поля.

рации) во времени. Такие изменения напрямую связаны с функцией G^{-+} :

$$n(r, t) = -iG^{-+}(rt, rt) = -i \sum_p G_p^{-+}(t, t) = \sum_p n_p. \quad (44)$$

Обсуждать правила диаграммной техники для неравновесных систем проще всего начать на примере поправки к обычной T -упорядоченной функции Грина

$$\hat{G}_{p,p'}^{\bar{-}}(t, t') = -i \langle T \hat{a}_p(t) \hat{a}_{p'}^+(t') \rangle \quad (45)$$

в случае, когда на частицы действует внешнее поле

$$\hat{V} = \sum_{p,q} a_{p+q}^+ a_p U_q(t). \quad (46)$$

Первый порядок теории возмущений содержит два слагаемых, соответственно от разложения матрицы эволюции S и S^+ :

$$-i \left\langle T_C \left[\left((-i) \int_{t_0}^t \sum_{p_1,q} a_{p_1+q}^+(t_1^-) U_q(t_1) a_{p_1}(t_1^-) dt_1 + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + (+i) \int_{t_0}^t \sum_{p_1,q} a_{p_1+q}^+(t_1^+) U_q(t_1) a_{p_1}(t_1^+) dt_1 \right) a_p(t^-) a_{p'}^+(t'^-) \right] \right\rangle, \quad (47)$$

разбивая это выражение на пары T_C -упорядоченных операторов, мы получим

$$G_{p+q,p}^{\bar{-}(1)} = \int_{t_0}^t dt_1 [G_{p+q}^{\bar{-}}(t-t_1) U_q(t_1) G_p^{\bar{-}}(t_1-t') - \\ - G_{p+q}^{\bar{+}}(t-t_1) U_q(t_1) G_p^{\bar{+}}(t_1-t')] . \quad (48)$$

Этой формуле соответствуют две диаграммы, показанные на рис. 2.

Второй член в этой формуле имеет знак минус — это отражение того факта, что обычные вершины, появляющиеся из оператора эволюции S , имеют множитель $(-i)$, а вершины со знаком $+$ появляются из обратного оператора S^+ (19) и имеют другой знак при мнимой единице: $(+i)$ (см. формулу (23)). И это правило общее — там, где появляется вершина $+$, должен быть изменён знак по сравнению с обычной диаграммной техникой.

Уже из этого примера видно, что возникает что-то вроде матричной структуры, так как функции Грина всегда, для любых взаимодействий, будут связаны в цепочки такого вида:

$$G^{\bar{-}} \propto G^{\alpha,\beta} G^{\beta\gamma} \dots G^{\delta-}, \quad (49)$$

где по всем промежуточным индексам, равным $+$ и $-$, есть суммирование.

В выражении (47) возникают по теореме Вика ещё два слагаемых, когда два внешних оператора спарены между

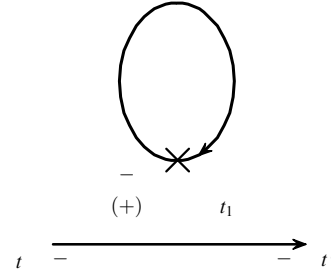


Рис. 3. Простейшие несвязанные диаграммы.

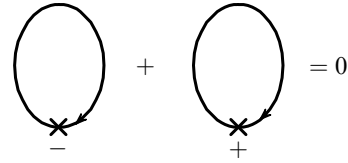


Рис. 4. Обращение в нуль суммы несвязных диаграмм.

собой и операторы из матриц эволюции также замкнуты сами с собой. Этим слагаемым соответствует диаграмма на рис. 3 и аналитическое выражение:

$$G_{pp'}^{\bar{-}}(t-t') \times \\ \times \int_{t_0}^t dt_1 \sum_{p_1} [G_{p_1,p_1+q}^{\bar{-}}(t_1, t_1) U_q(t_1) - G_{p_1,p_1+q}^{\bar{+}}(t_1, t_1) U_q(t_1)] . \quad (50)$$

Мы видим, что такие диаграммы, содержащие не связанные с основной линией части, обращаются в нуль: из-за смены знака в вершине $+$ одна замкнутая петля в точности уничтожает другую (рис. 4).

Это простейший пример очень важного свойства НДТ — для любого взаимодействия сумма всех несвязанных петель обращается в нуль. Любая несвязанная диаграмма, а следовательно и их сумма, представляет собой число, на которое умножаются все связанные диаграммы. Стандартными комбинаторными рассуждениями, разбивая каждый порядок теории возмущений на все возможные связанные и несвязные части, легко показать, что сумма всех несвязных петель — это есть разложение в ряд и вычисление каждого члена ряда по теореме Вика среднего от произведения обратной и прямой матрицы эволюции:

$$\text{Sp} [\rho_0 U^+(t, t_0) U(t, t_0)] - 1 = \text{Sp} [\rho_0] - 1 \equiv 0. \quad (51)$$

Поэтому не только для примера с внешним полем, но и для любого возмущения сумма всех замкнутых петель одного порядка в точности равна нулю. Ситуация полностью аналогична вычислению разложением в ряд, например, такой функции:

$$\exp(x) \exp(-x) = 1, \quad (1+x)(1-x) = 1 + O(x^2) \quad \text{и т.д.} \quad (52)$$

Таким образом, правила диаграммной техники для простого случая внешнего поля выглядят очень просто:

— рисуются все связанные топологически неэквивалентные диаграммы — точно так же, как в обычной диаграммной технике;

— внешним концам приписываются индексы "—", если мы вычисляем поправки к обычной T -упорядоченной функции, или любые другие для соответствующих корреляторов;

— во всех вершинах надо взять две возможности: "+" и "—", линии с разными знаками на концах соответствуют разным исходным функциям Грина, в вершине "—" стоит потенциал U , в вершине "+" стоит $-U$, т.е. потенциал с другим знаком.

Что касается интегрирования по времени в каждой вершине, то, пока мы придерживаемся исходной схемы вычисления средних от нескольких операторов с максимальным временем t , область интегрирования конечна: от начального момента времени t_0 , когда начало действовать возмущение, до данного времени t . Однако когда расположение времён операторов на временной оси друг относительно друга может меняться, неудобно постоянно следить за тем, какое из "внешних" времён является наибольшим. Для удобства область интегрирования может быть расширена до $+\infty$ тем же приёмом, что и в обычной диаграммной технике. Кроме того, в дальнейшем мы будем использовать и Фурье-представление, а для этого тоже необходимо расширить область интегрирования по промежуточным временам до бесконечности.

Поскольку матрица эволюции обладает свойством:

$$\begin{aligned} S^+(+\infty, t)S(+\infty, t) &= S^{-1}(+\infty, t)S(+\infty, t) = \\ &= S(t, +\infty)S(+\infty, t) = S(t, t) = 1, \end{aligned} \quad (53)$$

то такой единичный оператор может быть вставлен в исходные формулы:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle &= \\ &= \text{Sp} [\rho_0 S^+(t, -\infty) S^+(+\infty, t) S(+\infty, t) \hat{A} S(t, t') \hat{B} S(t', -\infty)]. \end{aligned} \quad (54)$$

И в представлении взаимодействия получится:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle &= \\ &= \text{Sp} [\rho_0 U^+(+\infty, -\infty) T \{ U(+\infty, -\infty) \hat{A}(t) \hat{B}(t') \}] = \\ &= \text{Sp} \left[\rho_0 T_{C_\infty} \left\{ \exp \left[-i \int_{C_\infty} \hat{V}(t_c) dt_c \right] \hat{A}(t^-) \hat{B}(t'^-) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (55)$$

Графически это действие можно изобразить как добавление к исходному контуру "пустой" петли, идущей от максимального времени в вычисляемых средних до $+\infty$ и обратно (рис. 5).

Хотя в исходных выражениях все интегралы по времени были ограничены максимальным временем t , а теперь интегрирование распространено до бесконечности, что, казалось бы, меняет величину каждого отдельного члена ряда теории возмущений, никакого парадокса

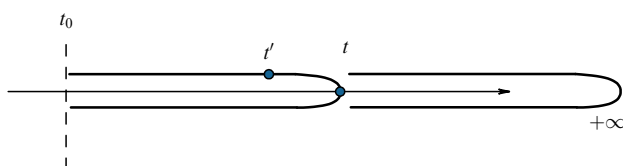


Рис. 5. Вид контура для стационарных задач.

здесь нет. Все члены данного порядка складываются таким образом, что остаются интегрирования только в исходной области времён. Перепишав уравнения НДТ в другом представлении, как это будет показано в следующем разделе, можно увидеть это явно. Если считать, что t — это максимальное время в тех операторах, средние от которых мы вычисляем, то в этом представлении в каждой диаграмме будут явным образом исключены области интегрирования по промежуточным временам от t до $+\infty$.

4. Матричные уравнения Дайсона. Различные матричные формулировки неравновесной диаграммной техники

Суммирование по двум возможным знакам в каждой вершине для случая внешнего поля легко записать в виде матричной операции, объединив в единое уравнение ряд теории возмущений для всех четырёх функций Грина $G^{--}, G^{-+}, G^{+-}, G^{++}$:

$$\hat{G}^{\alpha, \beta} = \hat{G}_0^{\alpha, \beta} + \hat{G}_0^{\alpha, \gamma} \Sigma^{\gamma, \delta} \hat{G}_0^{\delta, \beta} + \hat{G}_0^{\alpha, \gamma} \Sigma^{\gamma, \delta} \hat{G}_0^{\delta, \mu} \Sigma^{\mu, \nu} \hat{G}_0^{\nu, \beta} + \dots, \quad (56)$$

$$\hat{G}^{\alpha, \beta} = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}, \quad (57)$$

$$\Sigma^{\alpha, \beta} = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & -U \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Этот ряд стандартным образом может быть записан как уравнение Дайсона, только имеющее матричный вид

$$\hat{G}^{\alpha, \beta} = \hat{G}_0^{\alpha, \beta} + \hat{G}_0^{\alpha, \gamma} \Sigma^{\gamma, \delta} \hat{G}^{\delta, \beta}. \quad (59)$$

Здесь принято, что в каждой вершине происходит интегрирование по промежуточным временам и по координате или суммирование по импульсу, в зависимости от представления:

$$\begin{aligned} G_0^{\alpha, \gamma} \Sigma^{\gamma, \delta} G^{\delta, \beta} &= \\ &= \int dt_1 dt_2 \sum_{p_1, p_2} G_{p, p_1}^{\alpha, \gamma}(t, t_1) \Sigma_{p_1, p_2}^{\gamma, \delta}(t_1, t_2) G_{p_2, p}^{\delta, \beta}(t_2, t'). \end{aligned} \quad (60)$$

Для случая внешнего поля матричная неприводимая часть оказалась очень простой — локальной по времени и диагональной в пространстве келдышевских индексов "+, —".

Но уже для случая парного взаимодействия между частицами (31) дело обстоит сложнее. В первом порядке теории возмущений неприводимая часть также диагональна по индексам "+, —", но появляются две различные связанные диаграммы (рис. 6), которые соответствуют четырём вкладкам, так как в каждой вершине есть сумма по индексам "+, —". Например, второй диаграмме на

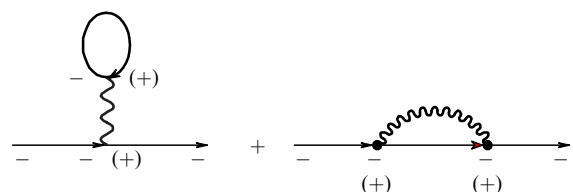


Рис. 6. Диаграммы первого порядка для парного взаимодействия.

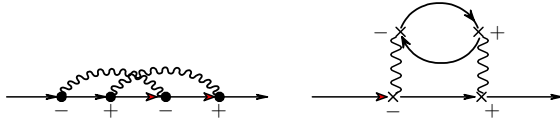


Рис. 7. Недиагональные по индексам "+"-" неприводимые части.

рис. 6 соответствует два члена:

$$G^{(1)++}(r, t; r', t') = \int G^{--}(r - r_1) [iG^{++}(r_1 - r_2) U(r_1 - r_2)] G^{--}(r_2 - r') \quad (61)$$

$$+ G^{++}(r - r_1) [-iG^{++}(r_1 - r_2) U(r_1 - r_2)] G^{++}(r_2 - r'). \quad (62)$$

Особенности правил для парного взаимодействия в том, что линии, соответствующей потенциалу взаимодействия, в зависимости от знака "+" или "-" ставятся в соответствие выражения:

$$U^{--} = -iU(r_1 - r_2), \quad U^{++} = +iU(r_1 - r_2), \quad (63)$$

содержащие, кроме смены знака, ещё и мнимую единицу.

В следующих порядках структура диаграмм становится сложнее, и если строить уравнение Дайсона обычным образом, выделяя неприводимые части в диаграммном ряду, то мы видим, что для парного взаимодействия уже во втором порядке появляются неприводимые части, показанные на рис. 7. Эти части недиагональны по индексам "+, -". То есть для всех случаев сложнее внешнего поля неприводимая часть является полноценной матрицей, в которой все элементы отличны от нуля. Таким образом, уравнение Дайсона в НДТ усложняется, превращаясь в систему из четырёх уравнений, которые всегда можно записать в матричном виде (59). Из-за того что появившиеся четыре функции Грина связаны в силу своего определения между собой соотношением (41), четыре компоненты неприводимой части также не являются независимыми:

$$\Sigma^{--} + \Sigma^{++} + \Sigma^{+-} + \Sigma^{-+} = 0. \quad (64)$$

Поэтому матричные уравнения можно упростить, оставив только независимые компоненты. Это делают обычно, подобрав матрицу линейного преобразования так, чтобы обратить в нуль один из элементов матрицы функций Грина (ФГ):

$$\hat{G} \Rightarrow L \hat{G} L^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & G^K \end{pmatrix}, \quad (65)$$

где матрица поворота $\hat{L}$ имеет вид

$$\hat{L} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (66)$$

Запаздывающая и опережающая функции Грина появились здесь как линейные комбинации введённых в НДТ функций $G^{\alpha, \beta}$

$$\hat{G}^R = \hat{G}^{--} - \hat{G}^{++} = \hat{G}^{+-} - \hat{G}^{-+}, \quad (67)$$

$$\hat{G}^A = \hat{G}^{--} - \hat{G}^{+-} = \hat{G}^{-+} - \hat{G}^{++}. \quad (68)$$

Однако эти комбинации и соответствуют в точности стандартным определениям запаздывающей и опережа-

ющей функций:

$$\begin{aligned} \hat{G}_p^R(t, t') &= -i \langle \hat{a}_p(t) \hat{a}_p^\dagger(t') \pm \hat{a}_p^\dagger(t') \hat{a}_p(t) \rangle \theta(t - t') = \\ &= -i \exp[-i\varepsilon_p(t - t')] \theta(t - t') \end{aligned} \quad (69)$$

(верхний знак — фермионы, нижний — бозоны).

Опережающая функция связана с запаздывающей соотношением $G^A(p, t, t') = [G^R(p, t', t)]^*$.

Третья новая функция называется сейчас обычно келдышевской функцией, она определена так:

$$\hat{G}^K = \hat{G}^{--} + \hat{G}^{+-} \equiv \hat{G}^< + \hat{G}^>. \quad (70)$$

Если запаздывающая (опережающая) функция определяется для фермионов антикоммутатором, то функция G^K есть среднее от коммутатора тех же операторов (для бозонов — наоборот, нижний знак в следующей формуле):

$$\begin{aligned} \hat{G}_p^K(t, t') &= -i \langle \hat{a}_p(t) \hat{a}_p^\dagger(t') \mp \hat{a}_p^\dagger(t') \hat{a}_p(t) \rangle = \\ &= -i \exp[-i\varepsilon_p(t - t')] (1 \mp 2n_p). \end{aligned} \quad (71)$$

В таком выборе "независимых переменных" в матричном уравнении Дайсона, как мы увидим ниже, есть правильная "идеология": запаздывающая и опережающая функции "отвечают" за изменение спектра системы под действием внешнего поля, взаимодействия и т.п., а келдышевская функция определяет неравновесное заполнение этого спектра.

Если провести преобразование (65) к треугольному виду матрицы функций Грина, то и преобразованная собственно энергетическая часть также становится треугольной матрицей:

$$\hat{\Sigma} \Rightarrow L \hat{\Sigma} L^{-1} = \begin{pmatrix} \Sigma^K & \Sigma^R \\ \Sigma^A & 0 \end{pmatrix}, \quad (72)$$

где

$$\begin{aligned} \Sigma^K &= -(\Sigma^{--} + \Sigma^{++}), \\ \Sigma^R &= \Sigma^{--} + \Sigma^{+-} = -(\Sigma^{++} + \Sigma^{-+}), \\ \Sigma^A &= \Sigma^{--} + \Sigma^{+-} = -(\Sigma^{++} + \Sigma^{-+}). \end{aligned} \quad (73)$$

Выпишем ещё раз матричное уравнение Дайсона

$$\hat{G}^{\alpha, \beta} = \hat{G}_0^{\alpha, \beta} + \hat{G}_0^{\alpha, \gamma} \Sigma^{\gamma, \delta} \hat{G}^{\delta, \beta} \quad (74)$$

и посмотрим в новом представлении, какой системе уравнений оно соответствует. Компоненты (1,2) и (2,1) дают два сопряжённых уравнения для запаздывающей и опережающей функций:

$$\hat{G}^R = \hat{G}_0^R + \hat{G}_0^R \Sigma^R \hat{G}^R. \quad (75)$$

В это уравнение входит только запаздывающая компонента неприводимой части. То есть процедура вычисления изменений спектра как будто отделилась от вычисления чисел заполнения или концентрации. На самом деле это, конечно, не так, потому что при вычислении Σ^R в большинстве случаев необходимо знать и функции G^{--} , G^{+-} , т.е. спектр сам зависит от неравновесных чисел заполнения.

Уравнение для келдышевской функции соответствует компоненте (2,2) матричного уравнения Дайсона и имеет

более сложный вид:

$$\begin{aligned}\hat{G}^K &= \hat{G}_0^K + [\hat{G}_0 \Sigma \hat{G}]^{22} = \\ &= \hat{G}_0^K + \hat{G}_0^K \Sigma^A \hat{G}^A + \hat{G}_0^R \Sigma^K \hat{G}^A + \hat{G}_0^R \Sigma^R \hat{G}^K.\end{aligned}\quad (76)$$

Матричная структура исходного уравнения проявилась в том, что в правой части возникли три интегральных члена различной структуры.

Заметим, что формулы для неприводимых частей Σ (64), (73) отличаются от соответствующих формул для функций Грина знаком (-1) при Σ^{-+} и Σ^{+-} . Это отличие связано с тем, что, как уже говорилось, появление вершины с индексом "+" всегда соответствует домножению всего выражения на (-1) по сравнению со знаком диаграмм с вершинами "-".

В форме (59) эта смена знака добавлена в определение Σ^{-+} и Σ^{+-} (в Σ^{++} знак меняется два раза — этой проблемы нет) — отсюда и появление этой (-1) . Поэтому, вычисляя неприводимые части, например, показанные на рис. 5, надо помнить, что полученные по общим диаграммным правилам выражения ещё надо домножить на (-1) из-за смены знака в одной из внешних вершин при подстановке их в уравнение Дайсона. При определении Σ^K так, как в (73), эта неприводимая часть вычисляется по общим правилам, как стандартная диаграмма (без учёта знаков во внешних вершинах), и во всех уравнениях типа (76) часть с Σ^K входит единообразно с Σ^R и Σ^A . Встречающееся иногда определение Σ^K без знака (-1) (см. (73)) неудобно из-за появления в вычислениях двойной смены знака. Во-первых, член с Σ^K в уравнении Дайсона (76) войдёт со знаком минус по сравнению с двумя другими членами и, во-вторых, ещё раз надо будет домножить на (-1) при подстановке вычисленной по диаграммам Σ^K в это уравнение.

Можно "автоматизировать" и учёт знака, и правила построения диаграмм в разных матричных представлениях, если ввести матричную (тензорную) вершину взаимодействия и определить правила её изменения при переходе от одного представления к другому. В исходной формулировке индексы всех функций Грина, примыкающих к вершине, одинаковы, и знак меняется на (-1) для вершины с индексом "+". То есть, рассматривая вершину как тензорную величину, связывающую матричные функции Грина, можно сказать, что любая вершина пропорциональна матрице σ_z и произведению некоторого количества δ -функций. Так, для электрон-фоонного взаимодействия (32) вершину можно записать так:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^k = g(\sigma_z)_{\alpha\beta} \delta_{\alpha k}, \quad (77)$$

где индекс k относится к фоонной функции Грина, а индексы α, β — к электронным. Для парного взаимодействия (31) матричная структура вершины выглядит следующим образом:

$$\Gamma_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} = \mathcal{U}(\sigma_z)_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\alpha\delta}, \quad (78)$$

где индексы α, β соответствуют входящим функциям Грина, а индексы γ, δ — выходящим (см. рис. 8).

Все правила вычисления диаграмм в НДТ становятся совершенно эквивалентными фейнмановским, только вместо линий надо понимать матрицу функций Грина, а в вершине стоит тензор соответствующего ранга, связывающий матричные функции Грина. Все изменения знака

при смене в вершине индекса "-" на "+" будут "заложены" в определение вершинного тензора.

В таком формализме, например, собственно энергетическая часть первого порядка для электрон-фоонного взаимодействия имеет вид

$$\Sigma^{\alpha\beta} = ig^2 \Gamma_{\alpha\beta_1}^k G^{\beta_1\gamma_1} D^{kq} \bar{\Gamma}_{\gamma_1\beta}^q. \quad (79)$$

После преобразования (65) в новом матричном представлении вершина для электрон-фоонного взаимодействия с излучением фоона будет иметь другой вид:

$$\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}^k = g \sum_{\alpha_1, \beta_1, k_1} \hat{L}_{\alpha\alpha_1} \Gamma_{\alpha_1\beta_1}^{k_1} \hat{L}_{\beta_1\beta}^{(-1)} L_{k_1k}^{(-1)}. \quad (80)$$

Используя явный вид (77), получим

$$\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}^1 = g \frac{1}{\sqrt{2}} \delta_{\alpha\beta}, \quad \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}^2 = g \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x)_{\alpha\beta}. \quad (81)$$

Такой вид вершин приводит к следующей структуре простейшей неприводимой части (79):

$$\Sigma^K = \Sigma^{11} = ig^2 \frac{1}{2} [G^A D^A + G^R D^R + G^K D^K], \quad (82)$$

$$\Sigma^R = \Sigma^{12} = ig^2 \frac{1}{2} [G^K D^R + G^R D^K].$$

Для парного взаимодействия мы рассмотрим аналогичные преобразования чуть ниже.

В литературе также пользуются несколько другим матричным представлением, получающимся из написанного выше, если "подвернуть" дополнительно матрицу функций Грина таким образом:

$$\hat{G} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{G}. \quad (83)$$

Тогда мы приходим также к треугольному представлению

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix}, \quad (84)$$

в котором функции R и A стоят на диагонали, а матрица неприводимых частей имеет такой же вид, как и сама функция Грина:

$$\hat{\Sigma} \Rightarrow L \hat{\Sigma} L^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K \\ 0 & \Sigma^A \end{pmatrix}. \quad (85)$$

В этом представлении, естественно, получаются те же уравнения (75), (76) для функций G^R и G^K , только теперь они соответствуют компонентам (1,1) и (1,2) матричного уравнения. Преобразования (65) являются унитарными, и в этом их очевидное преимущество, а новое преобразование (83), (84) неунитарно. Однако для неунитарного преобразования также можно сохранить автоматизм в применении правил НДТ, что мы ниже постараемся показать.

Следует заметить, что для многих задач можно использовать не келдышевскую функцию G^K , а просто функцию G^{-+} , непосредственно определяющую концентрацию или число частиц в определённых состояниях. Если посмотреть на выражение для функций Грина G^K (71), то мы увидим, что для фермионов

$$G^K \propto (1 - 2n_p). \quad (86)$$

Эта функция обладает симметрией частица – дырка, поэтому популярна в теории металлов. С другой стороны, подавляющее число физических величин (в том числе и концентрация электронов, и ток в металлах и туннельных контактах) выражается напрямую через G^{-+} . Для бозонов (фотонов, фононов)

$$G^K \propto 2 \left(\frac{1}{2} + n_p \right) \quad (87)$$

и определяет, тем самым, энергию в данной моде поля. Разумеется, и в функции G^K , и в функции G^{-+} содержится совершенно одинаковая информация, поэтому, какое представление применять — зависит от задач и, в большой степени, от привычки. Также, традиционно, в представлении, опирающемся на функцию G^{-+} , её обычно обозначают как $G^<$. Последнее обозначение появилось до работы [1], например, в работе [29], и его использование часто создает иллюзию, что в некоторых более ранних работах были заложены основы НДТ, что не соответствует действительности. До работы [1] не было предложено никакой диаграммной техники для вычисления этих функций. Однако это обозначение удобно, и мы также будем им пользоваться.

Треугольное представление с функцией $G^< \equiv G^{-+}$

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^< \\ 0 & G^A \end{pmatrix} \quad (88)$$

получается из исходной матрицы функций Грина преобразованиями, аналогичными использованным при выводе выражения (84). Совместное действие преобразований (65), (83), приводящее матрицу функций Грина к виду (84), может быть записано как

$$\hat{G} \Rightarrow \hat{U} \hat{G} \hat{V} \quad (89)$$

с матрицами

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (90)$$

Для получения треугольного вида (88) матрицы U и V должны иметь такой вид:

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_z + \sigma^-, \\ \hat{V} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1} - \sigma^-, \quad \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (91)$$

Преобразование неприводимой части Σ соответственно даётся обратными матрицами:

$$\hat{\Sigma} \Rightarrow \hat{V}^{-1} \hat{\Sigma} \hat{U}^{-1}, \quad (92)$$

где $\hat{U}^{-1} = \hat{U}$, $\hat{V}^{-1} = \hat{1} + \sigma^-$, и даёт тот же треугольный вид (85), только с заменой Σ^K на Σ^{-+} . После преобразования (91) компонента (12) матричного уравнения Дайсона выглядит совершенно аналогично уравнению для келдышевской функции (76):

$$\hat{G}^< = G_0^< + G_0^< \Sigma^A G^A + G_0^R \Sigma^< G^A + G_0^R \Sigma^R G^<. \quad (93)$$

Введённая в этом уравнении величина $\Sigma^<$, как и Σ^K (73), определяется с дополнительным знаком (-1) перед Σ^{-+} :

$$\Sigma^< = -\Sigma^{-+}. \quad (94)$$

Так же как при применении унитарного преобразования (65), для неунитарного тоже можно "автоматизировать" и процедуру перевода любой вершины взаимодействия в новое представление.

Например, для электрон-фононного взаимодействия (ср. с (80)) вершина с излучением фонона имеет вид

$$\tilde{g}_{\alpha\beta}^k = g \sum_{\alpha_1, \beta_1, k_1} \hat{V}_{\alpha\alpha_1}^{-1} \Gamma_{\alpha_1\beta_1}^{k_1} \hat{U}_{\alpha_1\alpha}^{-1} U_{k_1k}^{-1}, \quad (95)$$

а сопряжённая вершина с поглощением:

$$\tilde{g}_{\alpha\beta}^{*k} = g \sum_{\alpha_1, \beta_1, k_1} \hat{V}_{\alpha\alpha_1}^{-1} \Gamma_{\alpha_1\beta_1}^{k_1} \hat{U}_{\alpha_1\alpha}^{-1} V_{kk_1}^{-1}, \quad (96)$$

что даёт их явный вид, похожий на (81):

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{\alpha\beta}^1 &= g \delta_{\alpha\beta}, \quad \tilde{g}_{\alpha\beta}^2 = g \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \\ \tilde{g}_{\alpha\beta}^{*1} &= g \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{g}_{\alpha\beta}^{*2} = g \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (97)$$

Соответственно, вместо (82) имеем для простейшей неприводимой части (79):

$$\Sigma^< = \Sigma^{12} = i g^2 G^< D^<, \quad (98)$$

$$\Sigma^R = \Sigma^{11} = i g^2 (G^< D^R + G^R D^< + G^R D^R).$$

Для парного взаимодействия частиц (31) такое формальное преобразование вершины выглядит более громоздким, хотя получающийся ответ достаточно прост. После перехода в обсуждаемое треугольное представление вместо исходной вершины (78) появится такая комбинация:

$$\begin{aligned} \hat{g}_{\gamma_2\delta_2}^{\alpha_2\beta_2} &= \mathcal{U}(\hat{V}^{-1})^{\alpha_2\alpha} (\hat{V}^{-1})^{\beta_2\beta} (\sigma_z)_{\alpha\alpha} (\hat{U}^{-1})^{\alpha\gamma_2} (\hat{U}^{-1})^{\beta\delta_2} = \\ &= \mathcal{U}[\delta_{\alpha_2 1} \delta_{\beta_2 1} \delta_{1\gamma_2} \delta_{1\delta_2} - \delta_{\alpha_2 2} \delta_{\beta_2 2} \delta_{2\gamma_2} \delta_{2\delta_2} + \\ &+ (\delta_{\alpha_2 1} \delta_{\beta_2 2} + \delta_{\alpha_2 2} \delta_{\beta_2 1}) \delta_{1\gamma_2} \delta_{1\delta_2} + \\ &+ \delta_{\alpha_2 2} \delta_{\beta_2 2} (\delta_{2\gamma_2} \delta_{1\delta_2} + \delta_{1\gamma_2} \delta_{2\delta_2})]. \end{aligned} \quad (99)$$

В новом представлении появляются вершины уже не только со всеми одинаковыми индексами $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, в отличие от исходной картины. Но то же самое произойдёт и при использовании унитарного преобразования (65), в этом смысле неунитарное преобразование не добавляет новых трудностей. Аналогичным образом можно преобразовать вершины и для других типов взаимодействия.

Для примера покажем, как автоматически работает техника при вычислении неприводимой части второго порядка для парного взаимодействия (рис. 8)

$$\hat{\Sigma}^{\alpha\gamma_1} = \hat{g}_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} G_1^{\gamma\alpha_1} G_2^{\delta\beta_1} G_3^{\delta_1\beta_1} \Gamma_{\delta_1\gamma_1}^{\alpha_1\beta_1}. \quad (100)$$

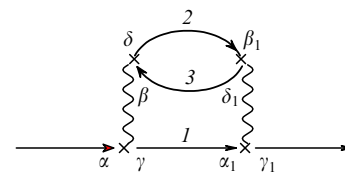


Рис. 8. Матричные вершины для парного взаимодействия в неприводимой части второго порядка.

Подставив сюда явный вид вершины (99), для $\Sigma^<$ и Σ^R получим

$$\begin{aligned}\Sigma^< &= \Sigma^{12} = \mathcal{U}^2 G_1^< G_2^< G_3^>, \\ \Sigma^R &= \Sigma^{11} = \mathcal{U}^2 (G_1^> G_2^R G_3^< + G_1^R G_2^< G_3^< + G_1^< G_2^> G_3^A).\end{aligned}\quad (101)$$

(Использована компактная запись с учётом соотношения $G^> = G^< + G^R - G^A$.)

Формальные соображения об одновременном преобразовании матрицы функций Грина и вершин взаимодействия позволяют показать, что в любом представлении НДТ мы имеем чётко определённые фейнмановские правила написания аналитических выражений по диаграммам, только линиям ставятся в соответствие матричные функции Грина, а вершинам — тензоры определённого ранга. Заметим, что существует и прямой способ (часто более простой) определять вид выражения, соответствующего определённым диаграммам в данном представлении, из исходного симметричного, пользуясь связью между различными функциями Грина и неприводимыми частями (67), (68), (73). Так, для диаграммы на рис. 8 для $\Sigma^< = -\Sigma^{++}$ сразу получается выражение $G_1^< G_2^< G_3^>$. Для вычисления Σ^R мы могли бы воспользоваться формулой $\Sigma^R = \Sigma^{--} + \Sigma^{+-}$ и соотношениями (67), (68) для входящих в диаграмму функций Грина, что также приводит к ответу (101).

Треугольные представления (65), (84), (88) можно назвать "более экономичными" не только из-за того, что в них оставлены независимые компоненты функции Грина, но и со следующей точки зрения. Мы расширили раньше для удобства область интегрирования по промежуточным временам до $+\infty$ (и немного позже это понадобится для перехода к фурье-представлению по времени), но, как отмечалось, область интегрирования от самого позднего времени во внешних операторах до $+\infty$ никакого вклада давать не должна. В исходном представлении каждая конкретная диаграмма содержала ненулевой вклад от добавленной временной области и только при сложении всех вкладов данного порядка такие вклады занулялись.

В треугольном представлении (65), (84), (88) в вычислениях с самого начала отсутствует эта фиктивная область из-за явной зависимости запаздывающих и опережающих функций от времени в виде $\theta(t - t')$. В уравнениях для G^R или G^A все промежуточные времена "зажаты" θ -функциями между временами-аргументами этих функций. В уравнении для функции $G^<$ (или G^K) (93) также в каждом члене в уравнении так расположены R- и A-функции, что интегралы по промежуточным временам всегда ограничены максимальным временем "внешних" усредняемых операторов.

Теперь посмотрим внимательнее на уравнение (76) или (93). Когда в системе присутствует возмущение, сильно меняющее состояния всех частиц, когда есть нестационарные переходные процессы, ясно, что заполнение всех состояний может сильно отличаться от начального (равновесного) распределения. Между тем в уравнении (76), (93) в правой части стоит функция G_0^K или $G_0^<$, которая определяется этим начальным распределением (37), и кажется, что в этом уравнении всегда остаётся память о начальном состоянии. Однако уже в первой работе [1] было показано, что присутствие G_0^K ($G_0^<$) в этом уравнении в некотором смысле "фиктивно". Дело в том, что матричное уравнение Дайсона (59) можно

превратить в интегро-дифференциальные с помощью обратного оператора-матрицы:

$$(\hat{G}_0)^{-1} = (G_0^R)^{-1} \sigma_z. \quad (102)$$

Для невзаимодействующих частиц оператор, обратный к G_0^R (69), выглядит так:

$$(G_0^R)^{-1} = i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p. \quad (103)$$

Действительно,

$$\begin{aligned}(G_0^R)^{-1} G_p^{0R} &= \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p \right) \left\{ -i\theta(t - t') \exp[-i\varepsilon_p(t - t')] \right\} = \\ &= \delta(t - t').\end{aligned}\quad (104)$$

А действуя на функцию $G_0^{<+}(G_0^<)$ (37), такой оператор даст нуль:

$$G_{0p}^<(t, t') = i n_p \exp[-i\varepsilon_p(t - t')], \quad (105)$$

$$(G_0^R)^{-1} G_{0p}^< = \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p \right) i n_p \exp[-i\varepsilon_p(t - t')] = 0. \quad (106)$$

Поэтому в исходном матричном представлении (см. выражения (67)):

$$\hat{G}_0^{-1} \hat{G}_0 = \hat{1}. \quad (107)$$

При переходе к треугольным представлениям матрица обратного оператора также преобразуется. Для преобразования (65):

$$\hat{\hat{G}}_0^{-1} = L \hat{G}_0^{-1} L^{-1} = (G_0^R)^{-1} \sigma_x. \quad (108)$$

Для преобразования (91):

$$\hat{\hat{G}}_0^{-1} = V^{-1} \hat{G}_0^{-1} U^{-1} = (G_0^R)^{-1} \hat{1}. \quad (109)$$

В дальнейшем мы будем использовать в основном треугольную матричную форму с $G^<$ (88). Как уже говорилось, такая формулировка полностью эквивалентна по построению "унитарной" треугольной форме (65), даёт эквивалентные уравнения Дайсона; правила построения диаграмм для вычисления неприводимых частей в этом представлении также автоматически вытекают из исходной симметричной по келдышевским индексам матричной формы. Все формулы, написанные ниже, почти "дословно" переносятся на каноническую треугольную форму (65) с заменой $G^<$ на G^K . Компонента (1,2) уравнения (107) в треугольном представлении (88), (109) сводится просто к действию оператора $(G_0^R)^{-1}$ на левую и правую части уравнения (93):

$$G_0^{-1} G^< = \Sigma^< G^A + \Sigma^R G^<. \quad (110)$$

В это уравнение уже не входит функция $G_0^<$ явным образом, а только точные функции $G^<$ в текущие моменты времени. Однако информация о начальной функции распределения содержится в начальных условиях этого интегро-дифференциального уравнения.

Для установившихся неравновесных состояний интегральное уравнение (93) можно преобразовать так, что зависимость от функции $G_0^<$ исчезнет совсем. Если перегруппировать члены уравнения (93) следующим образом:

$$[1 - \hat{G}_0^R \Sigma^R] \hat{G}^< = \hat{G}_0^< [1 + \Sigma^A \hat{G}^A] + \hat{G}_0^R \Sigma^< \hat{G}^A \quad (111)$$

и использовать уравнения для запаздывающей и опережающей функций Грина (75),

$$[1 - \hat{G}_0^R \Sigma^R] \hat{G}^R = \hat{G}_0^R, \quad (112)$$

$$\hat{G}_0^A [1 + \Sigma^A \hat{G}^A] = \hat{G}^A, \quad (113)$$

то, вводя обратные операторы к G^R , G^A , получим:

$$G^< = G^R [(G_0^R)^{-1} G_0^< (G_0^A)^{-1}] G^A + G^R \Sigma^< G^A. \quad (114)$$

Поскольку $(G_0^R)^{-1} G_0^< = 0$, то первый член в правой части (114) должен обратиться в нуль и явная зависимость от начальной функции $G_0^<$ исчезнет. На самом деле здесь заключена некоторая тонкость, которая ещё будет обсуждаться с разных точек зрения в дальнейшем. В любой "непатологической" системе, если все переходные процессы от начального состояния давно закончились, действительно, функция $G^<$ в текущий момент времени определяется только последним членом уравнения (114). Однако при переходе от исходного уравнения Дайсона (93) к уравнению (114) делались на самом деле неэквивалентные преобразования, связанные с применением обратных операторов $(G^R)^{-1}$ (103). Несколько огрубляя, можно сказать, что такие преобразования требуют решения некоторых дифференциальных уравнений по времени и последний член уравнения (114) описывает только неоднородные решения таких уравнений. Но выкинутые в процессе преобразования однородные решения важны для описания всех переходных процессов на конечных временах. Таким образом, исходное уравнение (93) такие переходные процессы описывает, поэтому в нём закономерно присутствует начальная функция $G_0^<$, а преобразованное уравнение (114), строго говоря, пригодно на больших временах, когда потеряна память о начальном состоянии. (Хотя под действием внешних возмущений система может находиться и в неравновесном, и в нестационарном состоянии.) В разделе 6 на простом примере мы постараемся это показать наглядно.

В результате получается, что если все переходные процессы от начального состояния закончились, то в установившемся режиме необходимо решить такую систему двух уравнений:

$$\hat{G}^K = \hat{G}^R \Sigma^K \hat{G}^A \quad \text{или} \quad \hat{G}^< = \hat{G}^R \Sigma^< \hat{G}^A, \quad (115)$$

$$\hat{G}^R = \hat{G}_0^R + \hat{G}_0^R \Sigma^R \hat{G}^R. \quad (116)$$

Фактически уравнений остаётся два, а не три, так как функция G^A всегда однозначно определяется функцией G^R ($G^A(r, t; r', t') = [G^R(r', t'; r, t)]^*$ или $G^A(p, \omega) = [G^R(p, \omega)]^*$).

Важно, что всё, что до этого говорилось, относилось к самому общему случаю, когда в начальный момент времени t_0 в системе начало действовать какое-то возмущение и мы описываем все изменения, которые происходят со временем, в том числе и переходные процессы. То есть самая общая формулировка НДТ во временном представлении позволяет описывать не просто неравновесные, но и любые нестационарные процессы. При этом функции Грина зависят от двух времён, что существенно усложняет вычисления по сравнению со стационарным случаем, когда все функции зависят только от разности времён. В разделе 5 показано, как от уравнения Дайсона перейти к дифференциальным уравнениям различного

типа, которые являются разновидностью квантовых кинетических уравнений и которые иногда проще применять для описания нестационарной ситуации.

Однако во многих случаях мы имеем дело с неравновесным, но стационарным состоянием — например, это задачи о состоянии твёрдого тела при постоянном действии излучения, задачи о туннелировании электронов при постоянной разности потенциалов на контакте и др. Тогда начальный момент времени t_0 должен быть отодвинут далеко в прошлое, т.е. $t_0 = -\infty$. В этом случае вычисления значительно упрощаются, так как для стационарных состояний можно перейти к фурье-представлению по времени.

Функции Грина невзаимодействующих частиц (37) в фурье-представлении имеют следующий вид:

$$G_p^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(p) + i\delta}, \quad (117)$$

$$G_p^{-+}(\omega) \equiv G_p^{0<}(\omega) = 2\pi i n_p \delta(\omega - \varepsilon(p)). \quad (118)$$

Если в начальный момент времени частицы находились в термодинамическом равновесии, то из-за наличия δ -функции $G^<$ можно записать так:

$$\begin{aligned} G_p^{0<}(\omega) &= 2\pi i n_0(\omega) \delta(\omega - \varepsilon(p)) = n_0(\omega) [G_p^{0A} - G_p^{0R}] = \\ &= 2i n_0(\omega) \operatorname{Im} G_p^{0A}(\omega). \end{aligned} \quad (119)$$

Функция Грина $G_p^{0<}$ представляет собой произведение спектральной функции $\operatorname{Im} G_p^{0A}(\omega)$ на функцию распределения частиц $n_0(\omega)$. Заметим, что, вообще говоря, замена n_p на $n(\omega)$ на самом деле не вполне эквивалентное преобразование, это хорошо показано в работе [30], на примере в разделе 6 будет видно, в чём тут тонкость.

Сравнение формулы (115) с (119) позволяет во многих случаях ввести функцию неравновесного распределения для частиц в определённых состояниях. Если в каком-то приближении для данного состояния $|\lambda\rangle$ неприводимая часть является диагональной, то уравнение (115) можно преобразовать к виду, аналогичному (119).

Пользуясь соотношением

$$\Sigma_{\lambda\lambda}^A - \Sigma_{\lambda\lambda}^R = (\hat{G}_{\lambda\lambda}^R)^{-1} - (\hat{G}_{\lambda\lambda}^A)^{-1} = \frac{\hat{G}_{\lambda\lambda}^A - \hat{G}_{\lambda\lambda}^R}{\hat{G}_{\lambda\lambda}^R \hat{G}_{\lambda\lambda}^A}, \quad (120)$$

мы можем записать $G^<(\omega)$ в таком виде:

$$\begin{aligned} \hat{G}_{\lambda\lambda}^{<}(\omega) &= \frac{\Sigma_{\lambda\lambda}^{<}(\omega)}{\Sigma_{\lambda\lambda}^A(\omega) - \Sigma_{\lambda\lambda}^R(\omega)} [\hat{G}_{\lambda\lambda}^A(\omega) - \hat{G}_{\lambda\lambda}^R(\omega)] = \\ &= 2i N_\lambda(\omega) \operatorname{Im} \hat{G}_{\lambda\lambda}^A(\omega). \end{aligned} \quad (121)$$

Здесь появилась величина, которую можно назвать неравновесной функцией распределения:

$$N_\lambda(\omega) = \frac{\Sigma_{\lambda\lambda}^{<}(\omega)}{\Sigma_{\lambda\lambda}^A(\omega) - \Sigma_{\lambda\lambda}^R(\omega)}. \quad (122)$$

Мы видим, что для определения неравновесных функций распределения и неравновесного заполнения каких-либо состояний нет необходимости решать кинетические уравнения. Достаточно вычислить по правилам НДТ неприводимые части $\Sigma^<$ и $\Sigma^{R,A}$.

Такие формулы могут описывать неравновесное заполнение дискретных электронных состояний в тун-

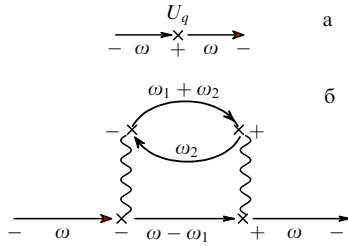


Рис. 9. Диаграммы, обращающиеся в нуль при $T = 0$.

нельных задачах, неравновесное возбуждение оптических мод или колебаний в молекулах, заполнение оптических мод в резонаторе.

Заметим, что информация, имеющаяся в неравновесных функциях распределения, богаче, чем информация о числах заполнения определённых состояний в полуклассических уравнениях баланса, так как числа заполнения на языке неравновесных функций Грина являются более грубой интегральной характеристикой:

$$N_\lambda = -iG_{\lambda\lambda}^<(t, t) = \int d\omega N_\lambda(\omega) \frac{1}{\pi} \text{Im} \hat{G}_\lambda^A(\omega). \quad (123)$$

Переход к фурье-представлению позволяет проследить, что происходит, когда температура стремится к нулю. В этом случае происходит усреднение по основному состоянию многочастичной системы и должна быть справедлива обычная диаграммная техника, построенная только на T -упорядоченных функциях G^{--} . Оказывается, что все диаграммы для функции G^{--} , в которых есть вершины со знаком "+", обращаются в нуль. Например, вклад от диаграммы на рис. 9а для фермионов равен:

$$G^{-+}(r - r_1, \omega) G^{+-}(r_1 - r', \omega) \propto n(\omega) [n(\omega) - 1] \rightarrow 0 \quad (124)$$

(для бозе-частиц сами функции $G^{--} \rightarrow 0$). В более сложных случаях, как на диаграмме 9б, всё равно числа заполнения входят в таких комбинациях, которые обращаются в нуль при $T \rightarrow 0$:

$$n(\omega - \omega_1) n(\omega_2 + \omega_1) [n(\omega) - 1] [n(\omega_2) - 1] \rightarrow [1 - \theta(\omega + \omega_2)] \theta(\omega + \omega_2) = 0. \quad (125)$$

Поэтому в случае $T = 0$ остаются только диаграммы со знаками "-" во всех вершинах.

Заметим, что сумма всех несвязных петель из диаграмм, в которые входят только G^{--} , не обращается в нуль. Поэтому при нулевой температуре необходимо либо с помощью стандартных рассуждений проводить сокращение множителя, соответствующего всем несвязным диаграммам, и доказывать, что остаются только связанные диаграммы, построенные из обычных ФГ, либо использовать НДТ, в которой сумма всех несвязных петель равна нулю, и доказывать, что в связанных диаграммах для обычной функции G^{--} остаются только такие обычные ФГ.

5. Квантовые кинетические уравнения

Обычно классические кинетические уравнения определяют закон изменения со временем числа частиц в

данном состоянии (концентрации в данной точке пространства)

$$\frac{\partial}{\partial t} n_p(t) = \dots \quad (126)$$

На языке НФГ это означает, что в левой части подобных уравнений должно стоять:

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \hat{G}_p^<(t, t) = \dots \quad (127)$$

Физические величины выражаются через функции Грина при совпадающих временных аргументах. Однако квантовые кинетические уравнения могут определять и скорость изменения ФГ по одному из аргументов, если второй выступает в роли параметра. Такие уравнения иногда проще решать, а ответ для физических величин будет получен, если в решении положить $t' = t$. Такие уравнения легко получить из уравнения Дайсона (93), подействовав на каждый член этого уравнения оператором $(G_0^R)^{-1}$ (103). Поскольку действие этого оператора на функции $G_0^<$ даёт нуль, в правой части уравнения Дайсона остаются только два члена (см. (110)). Так, для ФГ в импульсном представлении получим:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p \right] \hat{G}_{p,p'}^<(t, t') = \int \Sigma_{p,p_1}^<(t, t_1) \hat{G}_{p_1,p'}^A(t_1, t') dt_1 + \int \Sigma_{p,p_1}^R(t, t_1) \hat{G}_{p_1,p'}^<(t_1, t') dt_1. \quad (128)$$

В этом уравнении уже нет $G_0^<$, нет явной информации о начальных функциях распределения частиц. Эта информация о начальном состоянии входит в решение в качестве граничных условий при решении интегро-дифференциального уравнения.

Чтобы получить квантостатистический аналог уравнения Больцмана, написанное выше кинетическое уравнение дополняют сопряжённым ему уравнением, полученным из того же уравнения Дайсона, но переписанного в другом виде:

$$\hat{G}^<(t, t') = \hat{G}_0^<(t, t') + \hat{G}^< \Sigma^A \hat{G}_0^A + \hat{G}^R \Sigma^< \hat{G}_0^A + \hat{G}^R \Sigma^R \hat{G}_0^<. \quad (129)$$

Для того чтобы исключить функцию $G_0^<$, теперь надо подействовать "справа" на это уравнение оператором G_0^{-1} или, что то же самое, подействовать на второй аргумент функции Грина оператором, сопряжённым к $(G_0^R)^{-1}$:

$$(\hat{G}_0^R)^{* -1}(t') = -i \frac{\partial}{\partial t'} - \varepsilon_{p'}. \quad (130)$$

Вычитая из уравнения (128) полученное таким образом сопряжённое уравнение, мы приходим к обобщённому кинетическому уравнению:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_p + \varepsilon_{p'} \right] \hat{G}_{pp'}^<(t, t) = \int \Sigma_{pp_1}^<(t, t_1) \hat{G}_{p_1p'}^A(t_1, t) dt_1 + \int \Sigma_{pp_1}^R(t, t_1) \hat{G}_{p_1p'}^<(t_1, t) dt_1 - \int \hat{G}_{pp_1}^R(t, t_1) \Sigma_{p_1p'}^<(t_1, t) dt_1. \quad (131)$$

В этом уравнении положено $t = t'$, поэтому

$$i \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t'} \right] \Big|_{t=t'} \hat{G}^<(t, t') = i \frac{\partial}{\partial t} \hat{G}^<(t, t). \quad (132)$$

Отметим, что, хотя в левой части уравнения (131) стоит функция Грина с совпадающими временными аргументами, соответствующая определённой физической величине (или функции распределения), в правой части функции Грина и неприводимые части входят с существенно различными аргументами, что отражает квантовый характер полученного уравнения. Кроме того, в "столкновительную часть" входят функции Грина G^R , G^A , которые этим уравнением никак не определяются. В этом его отличие от классического уравнения Больцмана, которое является замкнутым уравнением на функцию распределения. Таким образом, в квантовом случае невозможно написать замкнутое уравнение, содержащие только функции Грина с совпадающими аргументами. Поэтому уравнение, которое в самом общем виде выглядит так:

$$(\hat{G}_0^{-1} - \hat{G}_0^{*-1})\hat{G}^< = (\hat{\Sigma}\hat{G})^< - (\hat{G}\hat{\Sigma})^<, \quad (133)$$

можно назвать квантовым кинетическим уравнением (квантовым обобщением уравнения Больцмана) только с той оговоркой, что запаздывающая и опережающая функции Грина уже определены из уравнения Дайсона (и сами могут зависеть от функции $G^<!$). Какие аргументы стоят у функций, входящих в уравнения (133), и как понимается произведение-свёртка операторов в правой части — зависит от представления, в котором решается задача. Правая часть представляет собой обобщённый интеграл столкновений, который может быть записан по-разному, если использовать соотношения между различными компонентами неравновесных функций Грина (41) и неприводимой части (64):

$$\begin{aligned} (\hat{\Sigma}\hat{G})^< - (\hat{G}\hat{\Sigma})^< &= \hat{G}^<\hat{\Sigma}^> - \hat{G}^>\hat{\Sigma}^< + \\ &+ (\hat{\Sigma}^R\hat{G}^< - \hat{G}^<\hat{\Sigma}^R) + (\hat{\Sigma}^<\hat{G}^A - \hat{G}^A\hat{\Sigma}^<) = \\ &= \hat{\Sigma}^R\hat{G}^< + \hat{\Sigma}^<\hat{G}^A - \hat{G}^R\hat{\Sigma}^< - \hat{G}^<\hat{\Sigma}^A. \end{aligned} \quad (134)$$

В том случае, когда возмущение системы невзаимодействующих частиц приводит к медленным изменениям во времени и пространстве, возможен переход к более простому квазиклассическому кинетическому уравнению. Слова "медленные изменения" означают, что если рассматривать все функции как функции суммарного и разностного аргумента:

$$G^<(r_1, t_1; r_2, t_2) = G^<\left(\frac{r_1 + r_2}{2}, \frac{t_1 + t_2}{2}; r_1 - r_2, t_1 - t_2\right), \quad (135)$$

то функция должна гораздо медленнее меняться по суммарному аргументу, чем по разностному. Скорость осцилляции ФГ по разности времён определяется масштабом энергий частиц.

Тогда, записывая функции Грина в координатном представлении, в котором

$$\begin{aligned} (\hat{G}_0^R)^{-1} \hat{G}^{0R}(rt, r't') &= \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta \right] \hat{G}^{0R}(rt, r't') = \\ &= \delta(t - t') \delta(r - r'), \end{aligned} \quad (136)$$

и переходя в представление Вигнера

$$\begin{aligned} G^<(R, t; p, \omega) &= \int \exp [i\omega(t_1 - t_2) - ip(r_1 - r_2)] \times \\ &\times G^<\left(\frac{r_1 + r_2}{2} = R, \frac{t_1 + t_2}{2} = t; r_1 - r_2, t_1 - t_2\right) d(r_1 - r_2) d(t_1 - t_2), \end{aligned} \quad (137)$$

можно упростить правую часть уравнения (131). В слагаемых вида ΣG , в силу медленности изменения по средним переменным, интегрирование по разностным переменным может приближённо рассматриваться как независимое. Поэтому

$$\begin{aligned} \int \Sigma_{pp_1}^<(t, t_1) \hat{G}_{p_1 p'}^A(t_1, t') \exp [i\omega(t - t')] dt_1 d(t - t') &\simeq \\ &\simeq \Sigma_{pp_1}^<(t, \omega) \hat{G}_{p_1 p'}^A(t, \omega). \end{aligned} \quad (138)$$

Для квадратичного закона дисперсии

$$\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{p-q} = \frac{p}{m} 2q \rightarrow \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial R}. \quad (139)$$

Тогда кинетическое уравнение приобретает знакомый вид классического уравнения Больцмана

$$\begin{aligned} \left[i \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial R} \right] \hat{G}_{p, \omega}^<(R, t) &= \\ &= \Sigma_{p\omega}^<(R, t) \hat{G}_{p\omega}^A(R, t) + \Sigma_{p\omega}^R(R, t) \hat{G}_{p\omega}^<(R, t) - \\ &- \hat{G}_{p\omega}^<(R, t) \Sigma_{p\omega}^A(R, t) - \hat{G}_{p\omega}^R(R, t) \Sigma_{p\omega}^<(R, t). \end{aligned} \quad (140)$$

Заметим, что свёртка функций, стоящая в правой части (131), может быть формально представлена в вигнеровском представлении в локальном виде, если ввести компактное обозначение, называемое обычно произведением Мойала [31]:

$$\int dr_1 \Sigma(r, r_1) G(r_1, r') \Rightarrow \Sigma_p(R) \otimes G_p(R), \quad (141)$$

где

$$\Sigma_p(R) \otimes G_p(R) = \Sigma_p(R) \exp \left[i \left(\overleftarrow{\partial_R} \overrightarrow{\partial_p} - \overleftarrow{\partial_p} \overrightarrow{\partial_R} \right) \right] G_p(R). \quad (142)$$

Такое же преобразование можно сделать по временным переменным. На самом деле такое произведение есть не что иное, как компактная запись разложения в ряд Тейлора функций в правой части квантового кинетического уравнения. Поскольку реально произведение Мойала сильно нелокально, введение его может иметь смысл только при построении градиентных разложений.

Кинетические квантовые уравнения исследовались ещё в работе [32], также уравнения подобного типа приведены в книге Каданова и Бейма [29]. Однако в этих работах не существовало общих стандартных рецептов вычисления неприводимых частей разного вида. В подходе [29] эти уравнения получались напрямую из гейзенберговских уравнений для операторов рождения-уничтожения, а неприводимая часть возникала в духе Швингера, как функциональная производная. В случае системы в термодинамическом равновесии единственный громоздкий способ заключался в аналитическом продолжении выражений конечных порядков теории возмущений тем-

пературной диаграммной техники на действительные частоты. В рамках НДТ подобные кинетические уравнения возникают как следствие уравнений Дайсона, как их дифференциальная форма, при этом для вычисления неприводимых частей имеется регулярная техника, такая же, как в обычной диаграммной технике.

6. Простой пример как полигон для изучения особенностей неравновесной диаграммной техники

В этом разделе на простом примере мы поясним, какие особенности возникают при применении общей теории. Рассмотрим систему, которая состоит из изолированного, локализованного электронного состояния и свободных электронов в объёме металла или полупроводника,

$$\hat{H}_0 = \varepsilon_1 a_1^\dagger a_1 + \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k. \quad (143)$$

Состояние, описываемое операторами a_1 , может быть одним из дискретных состояний атома, адсорбированного на поверхности металла, каким-либо примесным состоянием в полупроводнике и т.д. Операторы $c_k^\dagger$, c_k соответствуют зонным электронам. Во всех реальных случаях есть матричные элементы перекрытия между локализованными и свободными электронными состояниями, благодаря которым электрон с локализованного уровня может переходить в зону свободных состояний и обратно. Такое взаимодействие мы будем рассматривать как возмущение. Кроме того, пусть к локализованному состоянию может быть приложен дополнительный потенциал U — это простейший вариант действия внешнего поля. Таким образом, полный гамильтониан возмущения имеет вид:

$$\hat{V} = U a_1^\dagger a_1 + T \sum_k (c_k^\dagger a_1 + a_1^\dagger c_k). \quad (144)$$

Здесь T — матричные элементы перехода между локализованными и зонными состояниями, зависимость которых от k мы пренебрегли, как это часто делается. Рассматриваемая система схематически показана на рис. 10.

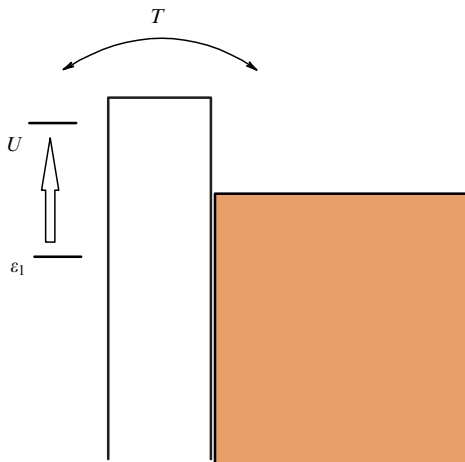


Рис. 10. Простая модельная система. Электронный уровень ε_1 связан туннельными переходами с объёмными состояниями.

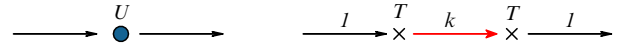


Рис. 11. Два вклада в неприводимую часть функции Грина локализованного состояния.

Если в начальный момент времени состояние ε_1 было заселено произвольным образом, то после включения взаимодействия (144) начнутся переходные процессы, к которым мы вернёмся чуть позже. А сначала найдем решение, соответствующее стационарной ситуации, когда все переходные процессы уже завершились. Диаграммы для неприводимой части локализованного состояния ε_1 показаны на рис. 11.

Этим диаграммам соответствует следующая матрица неприводимых частей для функции Грина G_{aa} локализованного состояния в представлении (88):

$$\hat{\Sigma}_{aa} = \begin{pmatrix} U + T^2 \sum_k G_k^{0R}(\omega) & T^2 \sum_k G_k^{0<}(\omega) \\ 0 & U + T^2 \sum_k G_k^{0A}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (145)$$

При вычислении появившихся здесь интегралов по импульсу часто пренебрегают действительной частью интеграла, оставляя только полюсной вклад:

$$\sum_k G_k^{0R}(\omega) = \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\delta} \simeq -i\pi v_k(\omega), \quad (146)$$

где v_k — плотность состояний зонных электронов.

Это даёт простое выражение для Σ_a^R :

$$\Sigma_a^R(\omega) = U + T^2 \sum_k G_k^{0R}(\omega) = U - i\gamma. \quad (147)$$

Здесь появилась характерная величина — скорость распада локализованного состояния (скорость переходов из локализованного состояния в непрерывный спектр):

$$\gamma = \pi T^2 v_k. \quad (148)$$

Уравнение Дайсона в фурье-представлении для G^R

$$\hat{G}^R = \hat{G}_0^R + \hat{G}_0^R \Sigma_a^R(\omega) \hat{G}^R = \hat{G}_0^R + \hat{G}_0^R (U - i\gamma) \hat{G}^R \quad (149)$$

легко решается, давая тривиальный ответ:

$$\hat{G}^R = \frac{1}{\omega - \varepsilon_1 - U + i\gamma}. \quad (150)$$

Уровень энергии локализованного состояния сдвинулся за счёт приложенного потенциала и уширился за счёт переходов в непрерывный спектр.

Теперь воспользуемся формулой $G^{<} = G^R \Sigma^{<} G^A$ (115) для определения стационарного заполнения локализованного состояния. Неприводимая часть $\Sigma^{<}$ равна:

$$\Sigma^{<}(\omega) = -\Sigma^{>}(\omega) = T^2 \sum_k G_k^{0<}(\omega) = 2i\gamma n_0(\omega) \quad (151)$$

(напомним, что $G_k^{0<}(\omega) = 2\pi i n_0(\omega) \delta(\omega - \varepsilon(k))$, n_0 — равновесная фермиевская функция распределения электронов в зоне).

Поэтому

$$\hat{G}^<(\omega) = \hat{G}^R \Sigma^< \hat{G}^A = \frac{2i\gamma}{(\omega - \varepsilon_1 - U)^2 + \gamma^2} n_0(\omega). \quad (152)$$

Это выражение также имеет понятный смысл: уширенная плотность состояний локализованного уровня за счёт связи с термостатом — зонными электронами — заполняется с равновесной фермиевской функцией распределения n_0 .

Если в этих выражениях теперь положить $\gamma \rightarrow 0$, т.е. локализованное состояние становится изолированным, то ответ для заполнения этого состояния при изменении на нём потенциала даётся выражением:

$$\begin{aligned} G^<(\omega) &= 2\pi i n_0(\omega) \delta(\omega - \varepsilon_1 - U) = \\ &= 2\pi i n_0(\varepsilon_1 + U) \delta(\omega - \varepsilon_1 - U). \end{aligned} \quad (153)$$

Мы получили, что уровень энергии изменился, а заполнение этого состояния определяется термодинамической функцией Ферми со сдвинутой энергией.

Однако если положить $T = 0$ ($\gamma = 0$) с самого начала, то мы увидим, что в матрице неприводимых частей (145) не будет недиагональной компоненты (1,2):

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix}, \quad \Sigma^R = \Sigma^A = U. \quad (154)$$

Поэтому формула (115) не может быть использована в данном случае. Функции G^R , G^A по-прежнему даются формулой (150), в которых положено $\gamma = 0$. Попробуем вернуться к формуле (114) и посмотреть внимательнее на первый член в правой части, отброшенный в дальнейшем изложении,

$$\hat{G}^< = \hat{G}^R [(\hat{G}_0^R)^{-1} \hat{G}_0^< (\hat{G}_0^A)^{-1}] \hat{G}^A. \quad (155)$$

В этом выражении мы будем обращаться с бесконечно малыми мнимыми добавками $i\delta$ как с малыми, но конечными величинами. Тогда получится следующее:

$$\hat{G}^<(\omega) = \hat{G}_0^<(\omega) \frac{(\omega - \varepsilon_1)^2 + \delta^2}{(\omega - \varepsilon_1 - U)^2 + \delta^2}. \quad (156)$$

Функция $G_0^<(\omega)$ (119) может быть записана так:

$$G_0^<(\omega) = 2\pi i n_0(\varepsilon_1) \delta(\omega - \varepsilon_1) = 2i n_0(\varepsilon_1) \frac{\delta}{(\omega - \varepsilon_1)^2 + \delta^2}. \quad (157)$$

Это позволяет получить ответ для $G^<(\omega)$ вполне регулярным образом:

$$\begin{aligned} G_a^<(\omega) &= 2i n_0(\varepsilon_1) \frac{\delta}{(\omega - \varepsilon_1 - U)^2 + \delta^2} = \\ &= 2\pi i n_0(\varepsilon_1) \delta(\omega - \varepsilon_1 - U). \end{aligned} \quad (158)$$

Заметим, что формулы (114), (155) могут быть с помощью (119) записаны в форме:

$$\begin{aligned} G_a^<(\omega) &= G^R [(\hat{G}_0^R)^{-1} (n_0(\varepsilon_1) (G_0^A - G_0^R)) (\hat{G}_0^A)^{-1}] G^A = \\ &= G^R n_0(\varepsilon_1) [(\hat{G}_0^R)^{-1} - (\hat{G}_0^A)^{-1}] G^A. \end{aligned} \quad (159)$$

В этой формуле в роли $\Sigma^<$ выступает $2n_0 \text{Im} \Sigma_0^R(\varepsilon_1)$ в общей формуле (115). Эта $\Sigma_0^R(\varepsilon_1)$ равна $2i\delta$, а не нулю, что

опять даёт ответ, написанный выше. Этот ответ показывает, что энергия уровня поменялась за счёт приложенного поля, но заполнение его осталось прежним. Однако заполнение уровня ε_1 не поменяется, только если использовать для исходной функции Грина $G_0^<(\omega)$ формулу (118). Если же стартовать с формулы (119), в которой благодаря δ -функции можно заменить $n_0(\varepsilon_1)$ на $n_0(\omega)$, то ответ для заполнения уровня изменится:

$$\begin{aligned} G_a^<(\omega) &= 2i n_0(\omega) \delta(\omega - \varepsilon_1 - U) = \\ &= 2\pi i n_0(\varepsilon_1 + U) \delta(\omega - \varepsilon_1 - U). \end{aligned} \quad (160)$$

В этом случае заполнение уровня будет определяться термодинамической функцией распределения для значения энергии, смещённого на величину приложенного поля. В своё время вопрос о том, почему, казалось бы, эквивалентные представления для функции $G_0^<$ приводят в некоторых задачах к разным ответам, обсуждался в литературе, но ответ здесь довольно простой — это вопрос о "степени изолированности" системы (или какого-либо состояния, моды в системе).

Обратившись к формуле (122), определяющей стационарные числа заполнения, мы видим, что, положив с самого начала $\gamma = 0$, мы бы получили неопределённость вида $0/0$:

$$N_a(\omega) = \frac{\Sigma_a^<(\omega)}{\Sigma_a^A(\omega) - \Sigma_a^R(\omega)} = \frac{2i\gamma n_0(\omega)}{2i\gamma}. \quad (161)$$

Возникающая неопределённость и возможность двойного ответа на самом деле не являются недостатком техники, а есть следствие того, что в реальности возможны две разные физические ситуации. Если рассматриваемый дискретный уровень — это уровень в атоме, находящемся далеко от любого твёрдого тела, т.е. действительно изолированный, то тогда поднесение к нему пластины конденсатора, повышающего потенциал всех состояний атома, никак не скажется на числе электронов на этом уровне. И это ответ (157). Если же мы рассматриваем примесный уровень в твёрдом теле, то за счёт многочисленных взаимодействий, не включённых напрямую в гамильтониан (160), изменение уровня энергии такого состояния неминуемо приведёт к изменению его заполнения в соответствии с термодинамическим распределением. Обращение с мнимыми добавками в знаменателях ФГ как с очень малыми, но конечными величинами, как раз означает, что таким образом мы неявно включаем связь этого состояния с большим термостатом. Значит, появляющаяся неопределённость на самом деле есть вполне определённый — и очень старый — физический вопрос. В каком порядке мы готовим систему: сначала полностью включаем связь с термостатом, а потом устремляем время в бесконечность, либо, наоборот, сначала дожидаемся, чтобы даже слабая связь с термостатом привела к термализации, а потом эту связь устремляем в нуль.

Поэтому правило, которое иногда рассматривается, как шаманское заклинание, что в функциях Грина $G^<$ невзаимодействующей системы надо заменять n_p на $n(\omega)$, соответствует просто пониманию того, что всегда есть, хоть и очень маленькая, связь нашей системы с окружающим миром-термостатом, что и приводит к формуле (153) благодаря раскрытию неопределённости по формуле (161). Это было хорошо объяснено ещё в работе [30].

Теперь рассмотрим, как в нашей системе описывать нестационарные переходные процессы. Для этого надо решить кинетическое уравнение (131) для функции $G_{aa}^<$:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \hat{G}_{aa}^<(t, t) = & \int_0^\infty \Sigma^<(t, t_1) \hat{G}^A(t_1, t) dt_1 + \\ & + \int_0^\infty \Sigma^R(t, t_1) \hat{G}^<(t_1, t) dt_1 - \int_0^\infty \hat{G}^<(t, t_1) \Sigma^A(t_1, t) dt_1 - \\ & - \int_0^\infty \hat{G}^R(t, t_1) \Sigma^<(t_1, t) dt_1. \end{aligned} \quad (162)$$

При этом мы считаем, что в начальный момент времени $t_0 = 0$ включается связь с зонными электронами и начинает действовать потенциал U , а число заполнения локализованного состояния имело значение $n_0(\varepsilon_1)$. Поскольку потенциал влияет только на изменение функций G^R , G^A , мы сразу же учтём его точно, просто изменив значение энергии локализованного состояния на U .

Неприводимые части Σ^R , Σ^A (146), (147) в широко-зонном приближении, когда $v(\omega) \simeq \text{const}$, локальны по времени:

$$\Sigma^R(t_1, t_2) = -i\gamma\delta(t_1 - t_2). \quad (163)$$

Неприводимая часть $\Sigma^<$ во временном представлении получается фурье-преобразованием (151)

$$\Sigma^<(t_1, t_2) = \int \frac{d\omega}{\pi} i\gamma n_0(\omega) \exp[-i\omega(t_1 - t_2)]. \quad (164)$$

Кинетическое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G^<(t, t) = & -2i\gamma G^<(t, t) - \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{(\omega - \varepsilon_1 - U)^2 + \gamma^2} \times \\ & \times \left\{ \gamma + \left((\omega - \varepsilon_1 - U) \sin[(\omega - \varepsilon_1 - U)t] - \right. \right. \\ & \left. \left. - \gamma \cos[(\omega - \varepsilon_1 - U)t] \right) \exp(-\gamma t) \right\} 2i\gamma n_0(\omega). \end{aligned} \quad (165)$$

Его решение с условием, что $-iG^<(0, 0) = n_a(0) = n_0(\varepsilon_1)$ ($n_1(t) = -iG^<(t, t)$):

$$\begin{aligned} n_1(t) = & n_0(\varepsilon_1) \exp(-2\gamma t) + \int \frac{d\omega}{\pi} n_0(\omega) \frac{\gamma}{(\omega - \varepsilon_1 - U)^2 + \gamma^2} \times \\ & \times \left[1 + \exp(-2\gamma t) - 2 \cos[(\omega - \varepsilon_1 - U)t] \exp(-\gamma t) \right]. \end{aligned} \quad (166)$$

Это решение описывает то, как протекают релаксационные процессы в нашем примере. При больших временах $t \gg 1/\gamma$ заполнение выходит на стационарное значение, определяемое равновесным заполнением сдвинутого на величину U и уширенного уровня:

$$n_1 = \int \frac{d\omega}{\pi} n_0(\omega) \frac{\gamma}{(\omega - \varepsilon_1 - U)^2 + \gamma^2}. \quad (167)$$

Разумеется, мы опять получили то же самое стационарное значение (152), которое находили раньше.

Точное решение показывает, что релаксация заполнения локализованного состояния не является экспоненциальной. На начальном этапе такая релаксация может быть даже немонотонной. Пример такого поведения показан на рис. 12.

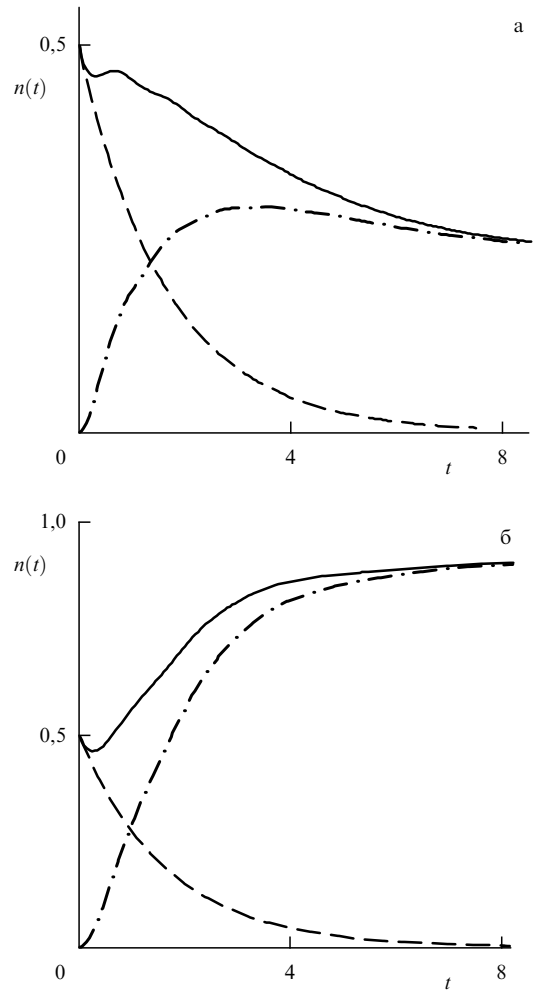


Рис. 12. Релаксация плотности на локализованном состоянии при различных параметрах модели. Начальное заполнение состояния $n = 1/2$. Пунктирной кривой показан вклад первого члена в формуле (166), штрихпунктирной — второго и сплошной линией — общая зависимость от времени плотности заряда (время измеряется в $1/\gamma$). Начальный участок демонстрирует неэкспоненциальный характер этой зависимости. (а) Энергия локализованного состояния выше уровня Ферми; (б) энергия локализованного состояния ниже уровня Ферми.

Только если огрубить наше описание, считая, что осциллирующие члены в правой части (165) при временах $> 1/\varepsilon_1$ дают малый вклад, мы придём к картине, которую ожидали бы по простым уравнениям баланса, опирающимся на вероятности перехода из локализованного состояния в непрерывный спектр. Тогда уравнение (165) может быть написано, как простое уравнение для $n_1(t) = -iG^<(t, t)$:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + 2\gamma \right] n_1(t) = 2\gamma n_0(\varepsilon_1 + U). \quad (168)$$

А его решение:

$$n_1(t) = n_0(\varepsilon_1 + U) [1 - \exp(-2\gamma t)] + n_0(\varepsilon_1) \exp(-2\gamma t). \quad (169)$$

Эта огрублённая формула показывает, что за время $t \simeq 1/\gamma$ локализованному состоянию будут "навязаны" числа заполнения, соответствующие равновесной функции распределения термостата.

Из формулы (169) хорошо видно, что произойдёт, если начать в нашем примере вычислять функцию Грина $G_{aa}^<$ шаг за шагом по теории возмущений, рассматривая как возмущение переходы между локализованным и зонными состояниями (именно переходы приводят к изменению заполнения состояний). Это теория возмущений по параметру $\gamma \propto T^2$ (см. вторую диаграмму на рис. 11). Но первые члены разложения решения (169) в ряд по параметру γ

$$-iG^<(t, t) = n_0(\varepsilon_1) + [n_0(\varepsilon_1 + U) - n_0(\varepsilon_1)]2\gamma t - [n_0(\varepsilon_1 + U) - n_0(\varepsilon_1)]2\gamma^2 t^2 + \dots \quad (170)$$

имеют секулярные расходимости по времени, показывая, что с теорией возмущений здесь нужна осторожность. То же самое получается и "в лоб", вычислением поправки первого порядка к $G_{aa}^{(1)<}(t, t)$:

$$G_{aa}^{(1)<}(t, t) = \int_0^\infty \int_0^\infty [G_0^<(t, t_1)\Sigma^A(t_1, t_2)G_0^A(t_2, t)dt_1 dt_2 + G_0^R(t, t_1)\Sigma^<(t_1, t_2)G_0^A(t_2, t)dt_1 dt_2 + G_0^R(t, t_1)\Sigma^R(t_1, t_2)G_0^<(t_2, t)dt_1 dt_2] \quad (171)$$

Подставив выражения для неприводимых частей (163), (164), легко убедиться, что первая поправка линейно расходится по времени.

Это характерная черта НДТ — появление степенным образом расходящихся по времени членов в конечных порядках ряда теории возмущений для функции $G^<$, если в системе протекают нестационарные процессы. По сути, такое поведение ряда теории возмущений как раз и является механизмом, благодаря которому в решении уравнения Дайсона для $G^<$ пропадает память о $G_0^<$, хотя в самом интегральном уравнении $G_0^<$ присутствует. Секулярные расходимости делают в ряде случаев бесполезным и неинформативным вычисления функции $G^<$ в первых порядках и сигнализируют о том, что система перестраивается из исходного совсем в другое состояние. Однако НДТ является в этом смысле перенормируемой теорией, приводящей к конечным физически правильным ответам. Одним из методов правильно описать такой переход является решение кинетических уравнений, полученных из уравнения Дайсона.

7. Нужна ли трёхкомпонентная техника как обобщение неравновесной диаграммной техники?

Простой пример, рассмотренный в предыдущем разделе, не только позволяет продемонстрировать некоторые технические особенности НДТ, но и помогает обсудить, нужна ли так называемая трёхкомпонентная техника. Эта техника появляется по следующим причинам. Изучение кинетики в многочастичных системах традиционно опирается на теорию отклика для системы, находящейся в термодинамическом равновесии. В такой теории отклика всегда возникает необходимость вычислять временные корреляторы некоторых операторов при конечной температуре. Оставив на конец раздела обсуждение возможности построения диаграммной техники для запаздывающих корреляторов, которая была развита в работе Константинова и Переля в 1960 г. [18], посмотрим на функции Грина в реальном времени при

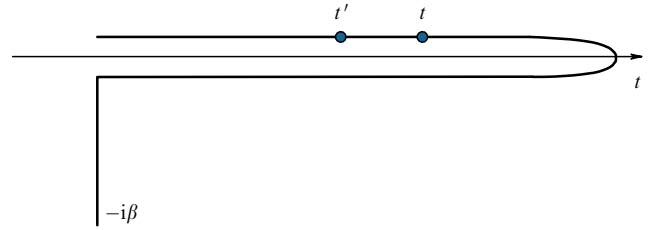


Рис. 13. Контур с тремя ветвями.

конечной температуре. Такая функция Грина определяется следующим образом:

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{\text{Sp} [\exp(-H/T)]} \times \text{Sp} \left[\exp\left(-\frac{H}{T}\right) \exp(iHt) \hat{A} \exp(-iHt) \exp(iHt') \hat{B} \exp(-iHt') \right] \quad (173)$$

Именно такого типа средние появлялись в известной работе Кубо [33] о вычислении отклика системы, находящейся в равновесии. В отличие от исходного выражения НДТ (24), здесь матрица плотности всегда предполагается гиббсовской, имеющей вид

$$\rho = \frac{\exp(-H/T)}{\text{Sp} [\exp(-H/T)]}.$$

Тогда, выделяя в гамильтониане возмущение $\hat{V}$, можно не только операторы эволюции в реальном времени, но и больцмановский фактор $\exp(-H/T)$ представить в виде T -упорядоченной экспоненты, так же как это делается в мацубаровской температурной технике.

Поскольку теперь под усреднением стоят три T -упорядоченных экспоненты в определённом порядке, то всю конструкцию можно записать как единое T_{C_3} -упорядочение по контуру C_3 , показанному на рис. 13,

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left[T_{C_3} \left\{ \exp \left[-i \int_{C_3} \hat{V}(t_c) dt_c \right] \hat{A}(t_c) \hat{B}(t'_c) \right\} \right] \quad (174)$$

Если усредняемые исходно операторы стоят в определённом порядке, как в (173), то времена в операторах $\hat{A}$, $\hat{B}$ должны быть приписаны разным ветвям контура вдоль действительной оси: $t'_c = t'^-$, $t_c = t^+$. Если усредняется обычное T -упорядоченное произведение, то надо положить $t'_c = t'^-$, $t_c = t^-$ и т.д. Любой коррелятор двух (и более) операторов всегда можно записать в виде (174), используя понятие T_{C_3} -упорядочения по контуру, содержащему три части.

В этом контуре появилась часть "вдоль мнимой оси времени". Такая графическая интерпретация возникает из-за того, что операторы в представлении взаимодействия в мацубаровской технике формально могут быть записаны следующим образом:

$$\hat{c}_p(\tau) = \exp(H\tau)c_p \exp(-H\tau) = \exp[iH(-i\tau)]c_p \exp[-iH(-i\tau)]. \quad (175)$$

Поскольку параметр τ в мацубаровской технике меняется от 0 до $\beta = 1/T$, возникает отрезок "мнимого времени" от 0 до $-i\beta$. В принципе, такому рисунку не надо

придавать буквальный смысл контура в "комплексной плоскости времени" — это просто наглядное объяснение того, что есть три группы операторов, стоящие в определённом порядке в любом члене ряда теории возмущений, и внутри каждой группы операторов тоже действует своё правило упорядочения.

В том случае, когда речь идёт только о временных корреляторах в термодинамически равновесном состоянии для системы с не зависящим от времени гамильтонианом, действительно можно придать термину "контур в комплексной плоскости времени" буквальный смысл. В этом случае можно ввести оператор эволюции в комплексном времени

$$U(z, z') = T_{Cz} \exp \left[-i \int_z^{z'} \hat{V}(z_1) dz_1 \right], \quad (176)$$

где z, z' — "комплексное" время вида $t + i\tau$. Для построения оператора возмущения в представлении взаимодействия также используются такие комплексные параметры времени [16, 34, 35]. Однако есть ряд физических ограничений на такой выход в комплексную плоскость времени. Условия сходимости всех выражений требуют, чтобы мнимая часть "комплексного времени" лежала в полосе $[0, -i\beta]$, а условия аналитичности функций Грина требуют, чтобы "мнимая часть времени" на контуре монотонно уменьшалась от 0 до $-i\beta$ [36]. Один из вариантов диаграммной техники, который соответствует выбору контура, показанному на рис. 14, был развит в работах Умедзава, Мацумото и Тачики [37] и назывался термополевой динамикой (Thermo Field Dynamics). В этом подходе контур идёт "сверху" вдоль действительной оси, потом следует отрезок вдоль мнимой оси от нуля до $-i\beta/2$, затем контур возвращается параллельно действительной оси до начального момента времени и завершает его отрезок по мнимой оси от $-i\beta/2$ до $-i\beta$. В этой теории усреднение операторов, принадлежащих вертикальным отрезкам, факторизуется, поэтому остаётся только нетривиальное усреднение операторов на линиях, параллельных действительной оси, и термополевая динамика — тоже двухкомпонентная техника, но для вычисления временных корреляторов в равновесной системе.

Подчеркнём ещё раз, что все операции, которые выглядят как аналитическое продолжение в плоскости времени, возможны только для временных корреляторов, вычисляемых по термодинамически равновесным формулам. Если гамильтониан системы (или возмущение, по которому строится диаграммная техника) зависит от времени, говорить об "аналитическом продолжении" по времени вообще невозможно. Заметим также, что активно использующиеся в различных работах [16, 29] соотношения для функций Грина комплексного времени типа соотношения Кубо – Мартина – Швингера

$$G^>(t - i\beta) = -G^<(t), \quad G^<(t + i\beta) = -G^>(t) \quad (177)$$

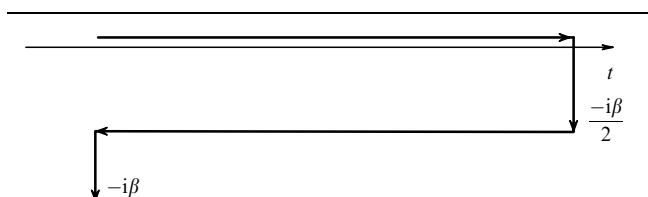


Рис. 14. Контур, использующийся в термополевой динамике.

верны только для случая термодинамического равновесия и если оператор возмущения не зависит от времени. В общем случае, как уже говорилось, выход в комплексную плоскость времени вообще не имеет смысла.

Кроме того, есть существенная разница с НДТ в том, что в теориях, использующих временные корреляторы в термодинамически равновесном состоянии, всегда используется гиббсовская матрица плотности $\rho = \exp(-H/T)/\text{Sp}[\exp(-H/T)]$. В НДТ начальная матрица плотности, вообще говоря, может быть любой, и теория позволяет описать все переходные и релаксационные процессы, которые происходят в системе после начала действия возмущения. Если говорить о больших временах, то в любой непатологической системе со временем происходит термализация и система за время эволюции забывает о своём начальном состоянии. Поэтому, казалось бы, не должно быть разницы, используется ли начальная матрица плотности $\rho_0 = \exp(-H_0/T)/\text{Sp}[\exp(-H_0/T)]$ для невзаимодействующих частиц, как это в большинстве случаев делается в НДТ, или полная матрица плотности $\rho = \exp(-H/T)/\text{Sp}[\exp(-H/T)]$, как в трёхкомпонентной технике. Аргументы, из-за которых некоторым авторам казалось, что без трёхкомпонентной техники не обойтись, заключались в том, что в некоторых задачах спектр состояний получается в НДТ правильным, а заполнение — не соответствующим термодинамически равновесному.

Постараемся на простых примерах показать, в чём тут дело.

Операция T_{C_3} -упорядочения позволяет обобщить теорему Вика и на этот случай, появляются функции Грина, в которых каждый из двух операторов может принадлежать одной из трёх ветвей контура, т.е. ФГ становятся матрицами 3×3 . В этом случае лучше использовать индексы "1, 2" вместо индексов "–, +", а индекс "3" использовать для обозначения операторов, лежащих на "мнимой" части контура.

Давайте применим эту технику к простому примеру, уже обсуждённому с разных сторон в разделе 6. Мы видели, что, когда связь дискретного состояния с термостатом — зонными электронами — обращается в нуль, ответ зависит от того, как этот предельный переход происходит. Посмотрим, что даёт трёхкомпонентная техника, если у нас есть только дискретное состояние и в момент времени t_0 для частицы в этом состоянии появляется дополнительный потенциал U :

$$H_0 = \varepsilon_1 a_1^+ a_1, \quad \hat{V} = U a_1^+ a_1. \quad (178)$$

Кроме четырёх уже определённых в НДТ функций Грина, появляются функции $G_{13}, G_{23}, G_{31}, G_{32}$. Обозначив переменную вдоль вертикального отрезка от 0 до $-i\beta$ как τ ,

$$\begin{aligned} G_{13}^0(t, \tau) &= -i \langle T_{C_3} a_1(t) a_1^+(\tau) \rangle = i \langle a_1^+(\tau) a_1(t) \rangle = \\ &= \frac{\text{Sp}[\exp(-H_0/T) a_1^+(\tau) a_1(t)]}{\text{Sp}[\exp(-H_0/T)]}. \end{aligned} \quad (179)$$

Явный вид операторов в представлении взаимодействия отличается для "мнимой" и действительной части контура

$$a(\tau) = \exp(H_0 \tau) a_1 \exp(-H_0 \tau), \quad (180)$$

$$a(t) = \exp[iH_0(t - t_0)] a_1 \exp[-iH_0(t - t_0)],$$

поэтому функции Грина G_{13} , G_{31} даже для неавтодействующей системы зависят от двух разных аргументов:

$$\begin{aligned} G_{13}^0(t, \tau) &= in(\varepsilon_1) \exp(\tau \varepsilon_1) \exp[-i\varepsilon_1(t - t_0)], \\ G_{31}^0(\tau, t) &= i(n(\varepsilon_1) - 1) \exp(-\tau \varepsilon_1) \exp[i\varepsilon_1(t - t_0)]. \end{aligned} \quad (181)$$

Из-за этого и в фурье-представлении надо рассматривать все ФГ как матрицы $G(\omega, \omega')$. При этом отдельно во временной или температурной части эти матрицы диагональны: $G(\omega)\delta(\omega - \omega')$, $G_{33}(\omega_n)\delta_{\omega_n, \omega'_n}$, а G_{13} имеет вид:

$$G_{13}^0(\omega, \omega_n) = i \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_1} 2\pi i \delta(\omega - \varepsilon_1) \exp(i\omega t_0). \quad (182)$$

Представление взаимодействия было выбрано таким образом, что в начальный момент времени операторы совпадали со шрёдингеровскими. Мы видим, что из-за смешанного характера функций G_{13}^0 в них появляется существенная зависимость от начального момента времени. Поэтому в уравнениях Дайсона необходимо вначале явным образом ограничивать интегралы снизу начальным моментом времени t_0 , и только в окончательных выражениях можно положить $t_0 \rightarrow -\infty$, рассматривая стационарную ситуацию.

Такое поведение недиагональных компонент, связывающих временной и температурный секторы, позволило привести аргументы [34, 35] в пользу того, что при больших временах из-за быстрых осцилляций, вызванных множителем $\exp(i\omega t_0)$, вклад недиагональных частей равен нулю и для описания системы достаточно обычной НДТ. (Или обычной температурной техники, если речь идёт о равновесных свойствах.)

Однако были приведены контрпримеры, в которых утверждалось, что иногда это не так. Эти примеры как раз касались изолированных состояний или изолированных мод в системе, так что на нашем примере будет видно, что происходит.

В силу того что третий, "температурный", отрезок лежит после обеих ветвей контура вдоль действительной оси, порядок операторов в функциях G_{23} и G_{13} один и тот же, поэтому $G_{23} = G_{13}$, $G_{32} = G_{31}$.

Матричная структура уравнения Дайсона сохраняется, просто теперь это матричное уравнение (3×3) , так как добавляются вершины, которые появились из разложения бозе-эйнштейновского множителя $\exp(-H/T)$, содержащие операторы с индексом "3", и в которых появляется связь функций Грина $G^{\alpha\beta} G^{3\beta}$.

В исходной формулировке трёхкомпонентной техники матрица ФГ выглядит в старых обозначениях НДТ так:

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{+-} & G_{13} \\ G^{+-} & G^{++} & G_{13} \\ G_{31} & G_{31} & G_{33} \end{pmatrix}. \quad (183)$$

Удобно сделать те же преобразования (65), которые приводят к треугольному представлению в НДТ:

$$\hat{G} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \hat{L} \hat{G} \hat{L}^{-1}, \quad (184)$$

где

$$\hat{L} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (185)$$

Тогда мы приходим к треугольному представлению

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K & \sqrt{2}G_{13} \\ 0 & G^A & 0 \\ 0 & \sqrt{2}G_{31} & G_{33} \end{pmatrix} \quad (186)$$

или при применении преобразований (88)–(91) к виду

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^< & G_{13} \\ 0 & G^A & 0 \\ 0 & G_{31} & G_{33} \end{pmatrix}. \quad (187)$$

Внешний потенциал в этом представлении соответствует неприводимой части, описывающейся диагональной матрицей:

$$\hat{\Sigma} = U \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (188)$$

Уравнение для $G^<$ — это компонента (1,2) матричного уравнения Дайсона:

$$\begin{aligned} G^<(t, t') &= G_0^<(t, t') + \int_{t_0}^{\infty} G_0^<(t, t_1) U G^A(t_1, t') dt_1 + \\ &+ \int_{t_0}^{\infty} G_0^R(t, t_1) U G^<(t_1, t') dt_1 + \int_0^{\beta} G_{13}^0(t, \tau) U G_{31}(\tau, t') d\tau. \end{aligned} \quad (189)$$

А компонента уравнения Дайсона (3,1) позволяет написать уравнение для G_{31} :

$$\begin{aligned} G_{31}(\tau, t') &= G_{31}^0(\tau, t') + \int_{t_0}^{\infty} G_{31}^0(\tau, t_1) U G^A(t_1, t') dt_1 + \\ &+ \int_0^{\beta} G_{33}^0(\tau - \tau_1) U G_{31}(\tau_1, t') d\tau_1. \end{aligned} \quad (190)$$

Уравнение (190) может быть решено в фурье-представлении по τ , как в обычной температурной технике. В нашем случае для задачи с фермионами разложение ведётся по нечётным мацубаровским частотам $\omega_n = (2n+1)\pi T$. А вот в уравнении (189) переходить в фурье-представление по времени не так удобно: из-за смешанного характера аргументов в функциях G_{31} , G_{13} необходимо аккуратно делать переход $t_0 \rightarrow -\infty$, принимая во внимание, что до этого перехода функции Грина $G^<$ в реальном времени зависят от двух аргументов, а не только от их разности. Потому проще воспользоваться смешанным представлением $G_{13}(t, \omega_n)$, в котором решение уравнения (190) выглядит так:

$$G_{31}(\omega_n, t') = \frac{i}{i\omega_n - \varepsilon_1} \frac{1}{1 - G_{33}^0(\omega_n)} \exp[i(\varepsilon_1 + U)(t' - t_0)]. \quad (191)$$

Не решая отдельно уравнение для G^A (поскольку ответ здесь очевиден), мы сразу использовали его явный вид

$$G^A(t, t') = i\theta(t' - t) \exp[-i(\varepsilon_1 + U)(t - t')]. \quad (192)$$

Функция G_{33} в этом формализме — это обычная мацубаровская функция

$$G_{33}^0(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_1}. \quad (193)$$

После подстановки этого решения для G_{31} в уравнение (189), заменив

$$\int_0^\beta G_{13}^0(t, \tau) U G_{31}(\tau, t') d\tau = T \sum_{\omega_n} G_{13}^0(t, \omega_n) U G_{31}(\omega_n, t'), \quad (194)$$

получаем, что последний член $G_{13}^0 U G_{31}$ принимает вид

$$\begin{aligned} T \sum_{\omega_n} G_{13}^0(t, \omega_n) U G_{31}(\omega_n, t') = \\ = T \sum_{\omega_n} \left[\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_1 - U} - \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_1} \right] \times \\ \times \exp[-i\varepsilon_1(t - t')] \exp[iU(t' - t_0)] = \end{aligned} \quad (195)$$

$$= i[n(\varepsilon_1 + U) - n(\varepsilon_1)] \exp[-i\varepsilon_1(t - t')] \exp[iU(t' - t_0)]. \quad (196)$$

Мы видим, что член с $G_{13} G_{31}$ выступает как источник в уравнениях для $G^<$, обеспечивая переход от начальных чисел заполнения $n(\varepsilon_1)$ к новым равновесным числам $n(\varepsilon_1 + U)$. Легко убедиться, что решением уравнения (189) во временном представлении с таким дополнительным членом будет функция

$$G^<(t, t') = in(\varepsilon_1 + U) \exp[-i(\varepsilon_1 + U)(t - t')]. \quad (197)$$

При этом в уравнении произойдёт полное сокращение функций $G_0^<(t, t') = in(\varepsilon_1) \exp[-i\varepsilon_1(t - t')]$ и исчезнет память о начальном заполнении $n(\varepsilon_1)$.

Аргументом в пользу необходимости использования трёхкомпонентной техники является то, что при приложении потенциала здесь заполнение согласованно изменяется, а при буквальном (и бездумном) применении НДТ должна получиться формула (158), содержащая исходное заполнение $n(\varepsilon_1)$. Однако мы видели, что тот же правильный ответ с новым заполнением $n(\varepsilon_1 + U)$ (158) мы получали в рамках НДТ, предположив, что наша система хоть и очень слабо, но связана с внешним термостатом. Получается, что нужда в трёхкомпонентной технике возникает, только если мы рассматриваем полностью изолированную систему (состояние), но при этом хотим, чтобы заполнение в такой системе (такого состояния) определялось термодинамически равновесным распределением Гиббса! Ясно, что это крайне нелогичная точка зрения — появление распределения Гиббса всегда означает наличие связи с термостатом. И если, как было показано, явно или неявно учесть слабое взаимодействие с термостатом, числа заполнения получаются такие же, как в трёхкомпонентной технике без дополнительного усложнения теории.

В примере с одним изолированным состоянием быстро осциллирующие множители в недиагональных функциях Грина сократились. Это произошло потому, что мы имели дело с сингулярной плотностью состояний, состоящей из дельта-функции.

В более сложных задачах проблема может быть закамouflирована. Поскольку сомнения в том, во всех ли случаях работает техника Келдыша, периодически

возникают вновь и вновь, приведём здесь кратко правильный путь решения более сложной задачи, рассмотренной в статье [38]. В этой работе сделано утверждение, что без трёхкомпонентной техники нельзя обойтись, вычисляя спиновую восприимчивость в модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - \sum_i h \hat{S}_i, \quad (198)$$

где h — внешнее магнитное поле. Для наших целей удобнее переписать этот гамильтониан через электронные операторы рождения и уничтожения. Тогда исходный гамильтониан равен:

$$H_0 = -h(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}), \quad (199)$$

а возмущением является обменное взаимодействие:

$$V = J(S^+ S^- + \dots) = J(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i+1\downarrow}^\dagger c_{i+1\uparrow} + \dots). \quad (200)$$

Противоречие, якобы обнаруженное в работе [38], состояло в следующем. В рамках RPA-приближения можно найти спектр магнонов, определяющийся полюсами коррелятора (восприимчивости) $\chi_R(\Omega, q)$. Этот спектр даётся одним и тем же выражением и в НДТ, и в трёхкомпонентной технике. Однако при вычислении чисел заполнения этих коллективных мод, т.е. при вычислении функции $\chi^<$ автор пришёл к выводу, что правильное термодинамически равновесное заполнение магнонных мод можно получить только в трёхкомпонентной технике. Покажем, что это не так, и приведём схему вычисления коррелятора поперечного отклика $\langle S^+ S^- \rangle$, позволяющую получить и правильное заполнение коллективных мод. В терминах электронных операторов коррелятор равен

$$\begin{aligned} \chi(q, \omega) = \int dt \sum_{R_0} \langle S_i^+(t) S_0^-(0) \rangle \exp(i\Omega t - iqR_0) = \\ = \int dt \sum_{R_0} \exp(i\Omega t - iqR_0) \langle c_{i\uparrow}^\dagger(t) c_{i\downarrow}(t) c_{0\downarrow}^\dagger(0) c_{0\uparrow}(0) \rangle. \end{aligned} \quad (201)$$

Как видно из правой части этого выражения, такой коррелятор соответствует простой двухчастичной электронной функции Грина G_2^{-+} , поэтому обозначим этот коррелятор как $\chi^<$. Вычисления такой двухчастичной функции проводятся в приближении случайных фаз (RPA), которое соответствует простому уравнению Бете – Солпитера, показанному на рис. 15.

Структура уравнений в RPA-приближении для двухчастичной функции полностью соответствует одночастичным уравнениям Дайсона (75), (93). Для нахождения функции $\chi^< = G_2^{-+}$ нужно определить сначала соответствующие запаздывающую и опережающую двухчастичные функции $\chi^R = G_2^R$ и $\chi^A = G_2^A$, уравнения для которых имеют тот же графический вид (см. рис. 15). В результате

Рис. 15. Уравнение для спиновой восприимчивости в приближении RPA.

$\chi^<$ определяется формулой, аналогичной (115):

$$\chi^<(q, \Omega) = [1 + J(q)\chi^R(q, \Omega)]\chi_0^<(\Omega)[1 + J(q)\chi^A(q, \Omega)], \quad (202)$$

где $\chi^{R,A}(q, \Omega)$ являются решениями уравнений, полностью аналогичных (75), с простой неприводимой частью $\Sigma^R = J(q)$:

$$\chi^R(q, \Omega) = \frac{\chi_0^R(\Omega)}{1 - J(q)\chi_0^R(\Omega)}, \quad (203)$$

а $\chi_0^<(\Omega)$ и $\chi_0^R(\Omega)$ — двухчастичные функции Грина (петли) нулевого порядка. Так,

$$\chi_0^<(\Omega) = \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{\downarrow}^>(\omega - \Omega)G_{\uparrow}^<(\omega). \quad (204)$$

(Аналогичное выражение для $\chi_0^R(\Omega)$ тоже легко выписывается по общим правилам НДТ.) Одноэлектронные функции Грина, соответствующие гамильтониану (199), здесь совсем простые, но мы учтём в них слабую связь электронов с внешним термостатом:

$$G_{\uparrow,\downarrow}^R(\omega) = \frac{1}{\omega \pm h + i\gamma}, \quad G_{\uparrow,\downarrow}^<(\omega) = n_F(\omega)(G^A(\omega) - G^R(\omega)). \quad (205)$$

Выражение (203) имеет полюс, соответствующий коллективным модам — магнонам с законом дисперсии $\Omega_q = 2h + J(q) \tanh(h/2T)$. А функция $\chi^<(q, \Omega)$ должна определять числа заполнения этих мод. Для неё из формулы (202) получается такой ответ:

$$\chi^<(q, \Omega) = \frac{\Omega - 2h + i\gamma}{\Omega - \omega_q + i\gamma} \frac{2\gamma n_F^2(\Omega/2)}{(\Omega - \omega_q)^2 + \gamma^2} \frac{\Omega - 2h - i\gamma}{\Omega - \omega_q - i\gamma}. \quad (206)$$

Пользуясь соотношением $n_F^2(\Omega/2) = n_B(\Omega) \tanh(\Omega/4T)$, отсюда получим

$$\chi^<(q, \Omega) = \tanh\left(\frac{\Omega}{4T}\right) \frac{2\gamma}{(\Omega - \omega_q)^2 + \gamma^2} n_B(\Omega) \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \tanh\left(\frac{\omega_q}{4T}\right) 2\pi n_B(\omega_q) \delta(\Omega - \omega_q). \quad (207)$$

Это выражение полностью соответствует компоненте (1,2) спиновой восприимчивости в формуле (3.33) из работы [38] и содержит правильные термодинамически равновесные числа заполнения магнонных мод, дающиеся бозе-распределением $n_B(\omega_q)$.

Кажущиеся затруднения, возникшие в работе [38], опять в том, что в рамках РРА-приближения магноны оказываются изолированными возбуждениями, никак не взаимодействующими ни друг с другом, ни с другими возбуждениями, как и электронный уровень в простом примере из раздела 6. Приходится повторить ещё раз: требовать, чтобы для изолированной ветви возбуждений, не взаимодействующей ни с чем, обязательно наблюдалось распределение Гиббса, просто неправильно. Нужно ввести маленькую связь с термостатом — в нашем выводе это константа γ , которая и обеспечивает установление термодинамического равновесия, а в конце положить её равной нулю — и у вас не будет никаких чудес и никакой необходимости в модификации НДТ.

Таким образом, оказывается, что трёхкомпонентная техника и НДТ при правильном применении дадут всегда один и тот же ответ, несмотря на разницу в начальных матрицах плотности. В любой физически осмысленной системе без внешних возмущений начальная матрица плотности в НДТ будет эволюционировать так, что восстановится правильное термодинамически равновесное состояние, что и было отмечено ещё в работе Келдыша [1]. Поэтому в трёхкомпонентной технике особой необходимости нет.

В этом разделе, посвящённом техникам, в которых смешиваются временные и температурные переменные, хотелось бы упомянуть и важную работу Константинова и Переля [18], являющуюся одним из предшественников работы Келдыша. В этой работе была построена диаграммная техника для вычисления линейного отклика системы с межчастичным взаимодействием на примере вычисления проводимости. В теории линейного отклика возникает необходимость в вычислении величин, которые содержат (в духе формулы Кубо [33]) интеграл следующего типа:

$$\int_0^\beta d\lambda \frac{1}{\text{Sp}[\exp(-H/T)]} \times \times \text{Sp} \left\{ \exp(-H/T) \exp[-iH(t + i\lambda)] a_p^+ a_p, \exp[iH(t + i\lambda)] a_{p_1}^+ a_{p_2} \right\}, \quad (208)$$

где t — момент времени, в который нас интересует отклик системы, a_p — электронные операторы, гамильтониан H включает в себя все взаимодействия в системе. Используя для таких выражений, как это описано выше, представление взаимодействия не только для временной эволюции, но и для бальмановского фактора $\exp(-H/T)$, Константинов и Перель пришли к идее о функциях Грина, определённых как упорядочение операторов на специальном контуре $S_{\text{КР}}$, показанном на рис. 16.

Поскольку этот контур имеет четыре различных участка, появляются многокомпонентные функции Грина, однако даже из рис. 16 можно понять, что получается довольно хитрая техника с гораздо более сложными правилами, чем правила келдышевской НДТ. Эти правила не позволяют так же просто, как в обычной технике, проводить подсуммирование каких-либо рядов, написать уравнение Дайсона и т.д. К сожалению, стартуя с вычислений запаздывающих корреляторов, непросто создать несложную диаграммную технику для их вычисления — замкнутой техники, оперирующей только

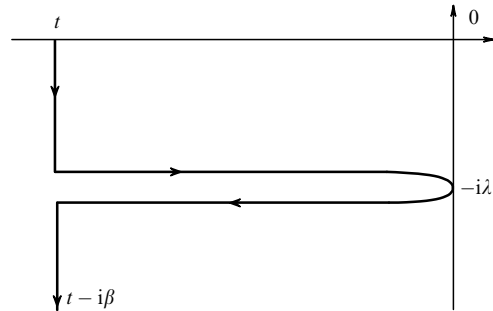


Рис. 16. Контур, использовавшийся в работе Константинова и Переля [18].

запаздывающими корреляторами, не существует, а прийти с этой стороны к НДТ, позволяющей рассчитывать в том числе и запаздывающие корреляторы, сложно.

Так сложилось, что нестационарные и неравновесные задачи в квантовой теории многих частиц рассматривались прежде всего с точки зрения теории отклика. При этом проблема построения теории разбивалась на два этапа. На первом выводились формулы типа формулы Кубо, которые позволяли выразить функции отклика через запаздывающие корреляторы соответствующих величин. А на втором разрабатывались методы вычисления запаздывающих корреляторов. В этом направлении большим продвижением были работы [2, 15], в которых были развиты методы аналитического продолжения, позволившие вычислять запаздывающие корреляторы в температурной (мацубаровской) технике.

Этот взгляд поддерживался традицией и привычкой. Но оказалось, что гораздо проще вычислять непосредственно поправку, например, к току или плотности (если речь идёт о проводимости или восприимчивости), так как они выражаются через функцию Грина $G^<$, для которой есть регулярная и простая диаграммная техника. Получается, что желание идти традиционным путём от запаздывающих корреляторов с использованием гиббсовского распределения заставило авторов работы [18] проделывать, в каком-то смысле, гораздо более трудную работу, чем это оказалось необходимым.

Любая теория отклика может быть легко сформулирована и в рамках НДТ, чему посвящён следующий раздел.

8. Теория отклика в рамках неравновесной диаграммной техники

Применению НДТ к теории отклика посвящено много работ (см. обзор [39]). Поэтому здесь мы изложим кратко только основные положения и приведём пример, который не обсуждается в других работах. Для определённости рассмотрим отклик системы электронов на электрическое поле, заданное скалярным потенциалом $\phi(r, t)$. В теории линейного отклика изменение плотности (заряда) определяется функцией отклика χ :

$$\delta n(r, t) = \int dt_1 dr_1 \chi(r - r_1, t - t_1) \phi(r_1, t_1). \quad (209)$$

Обычная теория отклика нацелена на вычисление этой функции отклика χ . Но вместо этого можно прямо вычислить изменение $\delta n(r, t)$, так как это есть просто изменение функции Грина $G^<(rt, rt)$ под действием возмущения

$$H_{\text{int}} = \int dr \hat{n}(r, t) \phi(r, t). \quad (210)$$

Изменение функции $G^<$ в первом порядке определяется диаграммами, показанными на рис. 17:

$$G^{(1)<}(rt, rt) = \int dt_1 dr_1 [G^R(rt, r_1 t_1) G^<(r_1 t_1, rt) + G^<(rt, r_1 t_1) G^A(r_1 t_1, rt)] \phi(r_1, t_1). \quad (211)$$

Поскольку

$$\delta n(r, t) = -i G^{(1)<}(rt, rt), \quad (212)$$

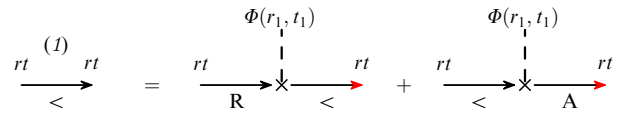


Рис. 17. Диаграммное выражение для линейной по внешнему полю поправки к нормальной функции Грина $G_1^{<+}$.

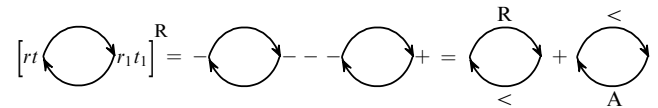


Рис. 18. Диаграммы для запаздывающего поляризационного оператора.

из этой формулы сразу же следует выражение для функции отклика в терминах функций Грина НДТ:

$$\chi(r - r_1, t - t_1) = -i \int dt_1 dr_1 [G^R(rt, r_1 t_1) G^<(r_1 t_1, rt) + G^<(rt, r_1 t_1) G^A(r_1 t_1, rt)]. \quad (213)$$

Из этой формулы и рис. 18 легко установить соответствие полученного выражения с обычной формулировкой линейного отклика, которая основана на вычислении коррелятора:

$$\chi(r - r_1, t - t_1) \propto \langle [n(rt), n(r_1 t_1)] \rangle \theta(t - t_1). \quad (214)$$

Запаздывающий коррелятор плотность – плотность в терминах функций НДТ является двухчастичной функцией Грина (поляризационным оператором) и определяется теми же формулами (67), что и одночастичная функция Грина:

$$\Pi^R = \Pi^{--} - \Pi^{++}. \quad (215)$$

Диаграммы для вычисления такого запаздывающего поляризационного оператора показаны на рис. 18.

Читатели, знакомые с мацубаровской диаграммной техникой, увидят, что два вклада в формуле (213) в точности соответствуют двум вкладам, появляющимся при аналитическом продолжении Элиашберга поляризационного оператора рис. 18 с дискретного набора мнимых частот на действительную ось.

8.1. Калибровочно-инвариантные функции отклика сверхпроводника

Если в системе есть взаимодействие между частицами, то построение линейного отклика представляет собой более сложную задачу, так как теперь внешнее поле будет действовать на каждую частицу не только непосредственно, но и косвенным образом. Скажем, изменение плотности частиц под действием внешнего поля в одной области пространства при наличии кулоновского взаимодействия создаст дополнительный потенциал, действующий на частицы в другой области. Пример, на котором хотелось бы показать некоторые преимущества НДТ при вычислении отклика в таких случаях, — это отклик сверхпроводников на электромагнитное поле. Довольно быстро после создания теории БКШ был вычислен отклик на поперечное поле (по сути, была хорошо решена задача о постоянном магнитном поле и

о поглощении излучения квазичастичными возбуждениями в сверхпроводнике). Но, из-за того что калибровочная инвариантность осуществляется в сверхпроводниках нетривиальным образом, долгое время существовала проблема правильного описания отклика на продольное электрическое поле. Благодаря работам многих авторов [40–42] стал ясен физический механизм восстановления калибровочной инвариантности и было понято, что, добавляя требование выполнения уравнения непрерывности, можно получить правильные формулы для отклика сверхпроводника на продольное поле.

Однако почему-то мало известен тот факт, что в рамках НДТ *автоматически* получаются полностью калибровочно-инвариантные формулы отклика, единым образом описывающие отклик сверхпроводника на любое электромагнитное поле. Подробно об этом написано в работе [43], здесь приведём только основную идею такого вычисления в рамках общей теории линейного отклика в НДТ.

Если при описании отклика сверхпроводника стартовать с гамильтониана БКШ

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}_\alpha^+(x) \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \right) \hat{\Psi}_\alpha(x) d^3\mathbf{r} - \int [\Delta(x) \hat{\Psi}_\downarrow^+(x) \hat{\Psi}_\uparrow^+(x) + \text{h.c.}] d^3\mathbf{r}, \quad (216)$$

то во внешнем поле, заданном потенциалами $\mathbf{A}(x)$ и $\varphi(x)$, полный гамильтониан имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int \hat{\Psi}_\alpha^+(x) \left(\frac{(\hat{\mathbf{p}} - (e/c)\mathbf{A}(x))^2}{2m} - \mu \right) \hat{\Psi}_\alpha(x) d^3\mathbf{r} + \\ & + \int e\varphi(x) \delta\hat{n}(x) d^3\mathbf{r} - \int [\Delta(x) \hat{\Psi}_\downarrow^+(x) \hat{\Psi}_\uparrow^+(x) + \text{h.c.}] d^3\mathbf{r} + \\ & + \frac{1}{2} \int \delta\hat{n}(x) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta\hat{n}(x') d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (217)$$

Индексы α, β в этом разделе будут определять спин электрона, а $x = (\mathbf{r}, t)$. Здесь для общности добавлено ещё кулоновское взаимодействие между электронами, необходимое для получения реального спектра коллективных мод в сверхпроводниках. В гамильтониане (217) учтено также наличие однородного положительно заряженного фона, обеспечивающего электронейтральность системы, что приводит к появлению оператора флуктуации плотности

$$\delta\hat{n}(x) \equiv \hat{\Psi}_\alpha^+(x) \hat{\Psi}_\alpha(x) - n \quad (218)$$

(n — плотность электронов в отсутствие поля) в слагаемых, содержащих скалярный потенциал и кулоновское взаимодействие между электронами $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$.

Заметим, что гамильтониан (217) не является инвариантным при калибровочных преобразованиях:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(x) & \rightarrow \mathbf{A}'(x) = \mathbf{A}(x) + \nabla\chi(x), \\ \varphi(x) & \rightarrow \varphi'(x) = \varphi(x) - \frac{1}{c} \frac{\partial\chi(x)}{\partial t}, \end{aligned} \quad (219)$$

$$\hat{\Psi}_\alpha(x) \rightarrow \hat{\Psi}'_\alpha(x) = \hat{\Psi}_\alpha(x) \exp \left[i \frac{e}{c} \chi(x) \right],$$

если воспринимать параметр порядка Δ как заданный внешний параметр. На самом деле, конечно, надо

помнить, что величина Δ всегда должна определяться самосогласованным образом по формуле

$$\Delta(x) = g \langle \hat{\Psi}_\uparrow(x) \hat{\Psi}_\downarrow(x) \rangle, \quad (220)$$

где g — константа сверхпроводящего спаривания. Если учитывать этот факт, то можно построить полностью калибровочно-инвариантную теорию линейного отклика сверхпроводников так, что в окончательных выражениях для тока и электронной плотности появятся только калибровочно-инвариантные комбинации потенциалов, описывающие электромагнитное поле.

Внешнее поле приводит к изменению состояний электронов в сверхпроводнике. Таким образом, параметр порядка (220) очевидно является функцией внешнего поля. В теории линейного отклика внешние поля предполагаются слабыми, поэтому возникающие изменения параметра порядка тоже малы:

$$\Delta = \Delta^{(0)} + \Delta^{(1)}, \quad (221)$$

где $\Delta^{(1)}$ — поправка к параметру порядка под действием поля. Таким образом, правильный гамильтониан возмущения для сверхпроводника, описываемого гамильтонианом БКШ (216), во внешнем поле должен быть записан следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} = & -\frac{1}{c} \int \hat{\mathbf{j}}^0(x) \mathbf{A}(x) d^3\mathbf{r} + \\ & + e \int \delta\hat{n}(x) \left[\varphi(x) + \frac{1}{e} \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \delta\hat{n}(x') \rangle^{(1)} d^3\mathbf{r}' \right] d^3\mathbf{r} - \\ & - \int \Delta^{(1)}(x) \hat{\Psi}_\downarrow^+(x) \hat{\Psi}_\uparrow^+(x) d^3\mathbf{r} - \int \Delta^{+(1)}(x) \hat{\Psi}_\uparrow(x) \hat{\Psi}_\downarrow(x) d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (222)$$

Здесь

$$\hat{\mathbf{j}}^0(x) = \frac{ie}{2m} [(\nabla \hat{\Psi}_\alpha^+(x)) \hat{\Psi}_\alpha(x) - \hat{\Psi}_\alpha^+(x) \nabla \hat{\Psi}_\alpha(x)] \quad (223)$$

— "парамагнитная" часть оператора плотности тока, а кулоновское взаимодействие учтено в приближении RPA.

Если в гамильтониане (222) рассматривать поправки к плотности и параметру порядка как некоторые заданные, хотя пока и неизвестные, линейные по внешнему полю величины, то легко вычислить линейную поправку по возмущению (222) к функции Грина $G^<$. Эта поправка складывается из трёх пар вкладов, показанных на рис. 19.

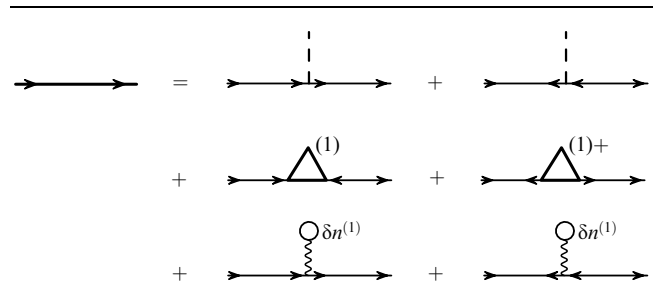


Рис. 19. Полное диаграммное выражение для линейной по внешнему электромагнитному полю поправки к нормальной функции Грина сверхпроводника G_1^{+-} . Пунктирной линии соответствует "затравочное" взаимодействие электронов с потенциалами $\mathbf{A}$ и φ . Треугольником обозначена поправка $\Delta^{(1)}$ к параметру порядка, волнистой линией — кулоновское взаимодействие между электронами V . Светлые кружки в третьей строчке выражения соответствуют изменённой под действием поля плотности электронов δn .

В качестве элементов, из которых строится диаграммная техника для сверхпроводника, кроме нормальных функций Грина G появляются ещё и аномальные функции F , в том числе $F_{\alpha\beta}^{-+}$, определённая без символа T -упорядочения:

$$G_{\alpha\beta}^{-+}(x, x') = i \langle \hat{\Psi}_{\beta}^{+}(x') \hat{\Psi}_{\alpha}(x) \rangle, \quad (224)$$

$$F_{\alpha\beta}^{-+}(x, x') = i \langle \hat{\Psi}_{\beta}(x') \hat{\Psi}_{\alpha}(x) \rangle.$$

С помощью этих функций выражения для флуктуаций плотности (218), тока и параметра порядка (220) можно записать следующим образом:

$$\delta n(x) = -2iG_1^{-+}(x, x), \quad (225)$$

$$\mathbf{j}(x) = -2 \frac{ie}{2m} (\nabla' - \nabla) G_1^{-+}(x, x') \Big|_{x'=x} - \frac{e^2 n}{mc} \mathbf{A}(x), \quad (226)$$

$$\Delta^{(1)}(x) = igF_1^{-+}(x, x). \quad (227)$$

Здесь индекс 1 обозначает поправку первого порядка по оператору возмущения (222) к соответствующей функции Грина, поскольку мы ограничиваемся теорией линейного отклика. Множитель 2 в (225), (226) возникает из-за суммирования по спину (взаимодействием спина электрона с магнитным полем пренебрегается, поэтому $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G$ и $F_{\alpha\beta} = i\sigma_{\alpha\beta}^y F$).

Из рисунка 19 видно, что, по сравнению со случаем невазаимодействующих частиц, в диаграммах линейного отклика для сверхпроводника, кроме собственно внешнего поля, в качестве "добавочных внешних полей" появились ещё поправки к параметру порядка и плотности электронов (при учёте кулоновского взаимодействия в приближении среднего поля).

Для того чтобы действительно найти изменения функции G^{-+} , определяющие весь линейный отклик, необходимо иметь уравнения, определяющие $\Delta^{(1)}$ и $\delta n(x)$ как функции внешнего поля. Предложенная впервые в работе [44] в рамках температурной техники обычная процедура состоит в том, что после вычисления функции Грина из диаграмм рис. 19, тока и изменения плотности по формулам (225), (226) надо потребовать, чтобы было выполнено уравнение непрерывности: $e \delta \rho n / \delta t + \text{div } \mathbf{j} = 0$. Это уравнение даёт связь, позволяющую определить $\Delta^{(1)}$ как функцию внешних полей $\mathbf{A}$, φ (если не рассматривать кулоновское взаимодействие). После подстановки найденной связи в формулы для тока и заряда восстанавливается калибровочная инвариантность функций отклика.

Однако существует метод, "уважающий" калибровочную инвариантность на каждом шаге вычислений. Этот метод использует уравнения самосогласования на параметр порядка и флуктуации плотности электронов. Стоящая в правой части диаграммного уравнения на рис. 19 величина $\Delta^{(1)}$ определяется аномальной функцией F^{-+} при совпадающих аргументах (227). Для функции F^{-+} существует совершенно аналогичное G^{-+} (см. рис. 19) выражение, описывающее изменение аномальной функции в первом порядке по H_{int} . Поэтому для $\Delta^{(1)}$ возникает уравнение, показанное на рис. 20, где соединение концов аномальной функции Грина напоминает о совпадающих аргументах x и x' .

Точно так же и для изменения плотности электронов $\delta n(x) = -2iG_1^{-+}(x, x)$ мы приходим к уравнению, пока-

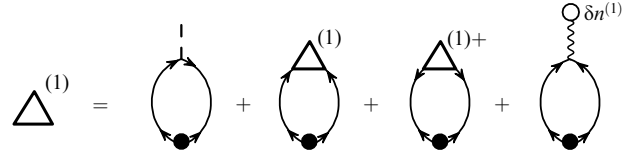


Рис. 20. Графический вид уравнения самосогласования для линейной по внешнему полю поправки $\Delta^{(1)}$ к параметру порядка. Чёрный кружок обозначает константу взаимодействия БКШ g .

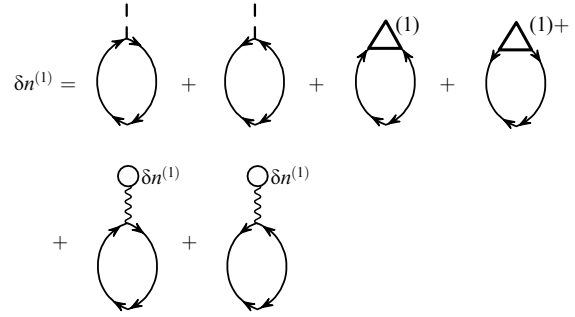


Рис. 21. Графический вид уравнения самосогласования для изменения плотности электронов δn в линейном по внешнему полю приближении.

занному на рис. 21. Для нормального металла это уравнение давало бы обычный учёт экранировки в рамках RPA.

Для правильного учёта калибровочной инвариантности надо аккуратно выделить эффекты, связанные с фазой параметра порядка. Дело в том, что малыми являются поправки к модулю и градиенту фазы параметра порядка. Изменение же самой фазы (а следовательно, и всего параметра порядка) могут быть порядка 1.

Разделим явным образом изменение параметра порядка Δ на изменение его модуля и фазы во внешнем поле:

$$\Delta(x) = (\Delta_0 + \Delta_1) \exp[i\theta(\mathbf{A}, \varphi)].$$

Калибровочным преобразованием сделаем параметр порядка вещественным. (Подчеркнём, что фаза θ пока является неизвестной функцией $\mathbf{A}$, φ .) При таком преобразовании потенциалы в соответствии с (219) приобретут добавку:

$$\mathbf{A}'(x) = \mathbf{A}(x) - \frac{c}{2e} (\nabla \theta(x))^{(1)}, \quad (228)$$

$$\varphi'(x) = \varphi(x) + \frac{1}{2e} \left(\frac{\partial \theta(x)}{\partial t} \right)^{(1)}.$$

Подставив $\mathbf{A}'$, φ' в качестве внешних полей в диаграммы рис. 19, получим следующее выражение для тока и плотности заряда (объединённых для компактности записи в 4-вектор тока $j = (\delta n, \mathbf{j})$):

$$j_{\mu}(q) = -\frac{e}{c} \left(Q_{\mu\nu}^A(q) + \frac{n}{m} \delta_{\mu\nu} (1 - \delta_{\mu 0}) \right) A_{\nu}'(q). \quad (229)$$

Здесь введены 4-векторные обозначения для потенциалов поля (228) $A'(q) = (c\varphi'(q), \mathbf{A}'(q))$ и взято фурье-преобразование по пространственным и временным переменным: $q = (\omega, \mathbf{q})$. Поляризационный оператор Q^A есть

петля из двух функций Грина, явный вид его приведён ниже. Для простоты написано выражение для сверхпроводника без учёта кулоновского взаимодействия и в пренебрежении изменением модуля параметра порядка. Это выражение не определяет ещё отклик тока на внешнее электромагнитное поле, так как преобразованный потенциал A' содержит кроме внешнего поля ещё и неизвестную функцию — градиент фазы параметра порядка $\nabla\theta(x)$. Эту неизвестную функцию можно определить из уравнения самосогласования (см. рис. 20), которое после калибровочного преобразования имеет вид

$$\Delta^{(1)}(q) = -\frac{e}{c} \Pi_v^A(q) A'_v(q) - (\Pi^A(q) + \Pi^{\Delta^+}(q)) \Delta^{(1)}(q). \quad (230)$$

Конкретный вид различных поляризационных операторов (петель из двух функций Грина) Π , который легко найти из диаграмм рис. 17, нам сейчас не важен.

Мы выделили фазу θ так, что параметр порядка $\Delta^{(1)}$ стал действительной величиной. Но уравнение (230) является комплексным, поэтому позволяет одновременно определить и действительную поправку Δ_1 — это реальная часть уравнения (230), и связь θ с внешним полем — это мнимая часть уравнения (230). После того как из мнимой части уравнения самосогласования фаза θ оказывается выражена через внешние потенциалы φ , A , в правой части уравнения (229) будут стоять только заданные внешние потенциалы. Тем самым мы получим формулы линейного отклика, связывающие ток в сверхпроводнике с внешним полем.

Детали вычисления можно посмотреть в работе [43], здесь же только подчеркнём, что в рамках НДТ единственное, что требуется, — это вычислить несколько поляризационных операторов (двухчастичных функций), вполне аналогичных самому простому поляризационному оператору (213) (см. рис. 18). Отличие в том, что эти поляризационные операторы состоят не только из нормальных, но и из аномальных функций Грина, как видно из рис. 20 и 21. Суммирование по келдышевским индексам оказывается таким же, как и в простом поляризационном операторе (213), так что все используемые поляризационные петли являются тоже запаздывающими.

Приведём здесь явный вид только тех поляризационных петель, которые входят в окончательный ответ для функций отклика (их можно получить с помощью диаграмм, изображённых в первом ряду на рис. 21):

$$\begin{aligned} Q_{kl}^A(q) = & -2i \frac{1}{m^2} \int \left(p_k + \frac{q_k}{2} \right) \left(p_l + \frac{q_l}{2} \right) \times \\ & \times \left[G_0^R(p+q) G_0^{-+}(p) + G_0^{-+}(p+q) G_0^A(p) - \right. \\ & \left. - F_0^R(p+q) (F^+)_{0}^{-+}(p) - F_0^{-+}(p+q) (F^+)_{0}^A(p) \right] \frac{d^4 p}{(2\pi)^4}, \end{aligned} \quad (231)$$

$$\begin{aligned} Q_{k0}^A(q) = Q_{0k}^A(q) = & -2i \frac{1}{m} \int \left(p_k + \frac{q_k}{2} \right) \times \\ & \times \left[G_0^R(p+q) G_0^{-+}(p) + G_0^{-+}(p+q) G_0^A(p) + \right. \\ & \left. + F_0^R(p+q) (F^+)_{0}^{-+}(p) + F_0^{-+}(p+q) (F^+)_{0}^A(p) \right] \frac{d^4 p}{(2\pi)^4}, \end{aligned} \quad (232)$$

$$\begin{aligned} Q_{00}^A(q) = & -2i \int \left[G_0^R(p+q) G_0^{-+}(p) + G_0^{-+}(p+q) G_0^A(p) - \right. \\ & \left. - F_0^R(p+q) (F^+)_{0}^{-+}(p) - F_0^{-+}(p+q) (F^+)_{0}^A(p) \right] \frac{d^4 p}{(2\pi)^4}. \end{aligned} \quad (233)$$

Окончательно формулы отклика для сверхпроводника через эти поляризационные операторы в фурье-представлении записываются в виде

$$\begin{aligned} \delta n = & ieq_k \left(\left(Q_{kl}^A + \frac{n}{m} \delta_{kl} \right) Q_{00}^A - Q_{k0}^A Q_{0l}^A \right) E_l \times \\ & \times \left[q_{k'} \left(Q_{k'l'}^A + \frac{n}{m} \delta_{k'l'} \right) q_{l'} - 2\omega Q_{0l'}^A q_{l'} + \omega^2 Q_{00}^A - \right. \\ & \left. - V q_{k'} q_{l'} \left(\left(Q_{k'l'}^A + \frac{n}{m} \delta_{k'l'} \right) Q_{00}^A - Q_{k'0}^A Q_{0l'}^A \right) \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (234)$$

$$\begin{aligned} j_k = & -\frac{e^2}{c} \left(Q_{kl}^A + \frac{n}{m} \delta_{kl} \right) \left(A_l - \frac{q_l q_{l'}}{q^2} A_{l'} \right) + \\ & + ie^2 \left(\left(Q_{kl}^A + \frac{n}{m} \delta_{kl} \right) Q_{00}^A - Q_{k0}^A Q_{0l}^A \right) \omega \times \\ & \times \left[q_{k'} \left(Q_{k'l'}^A + \frac{n}{m} \delta_{k'l'} \right) q_{l'} - 2\omega Q_{0l'}^A q_{l'} + \omega^2 Q_{00}^A - \right. \\ & \left. - V q_{k'} q_{l'} \left(\left(Q_{k'l'}^A + \frac{n}{m} \delta_{k'l'} \right) Q_{00}^A - Q_{k'0}^A Q_{0l'}^A \right) \right]^{-1} \frac{q_l q_{l'}}{q^2} E_{l'}. \end{aligned} \quad (235)$$

Здесь $V = 4\pi e^2/q^2$ — фурье-образ кулоновского потенциала. Наиболее существенно в этих формулах то, что потенциалы A и φ вошли только в явно калибровочно-инвариантных комбинациях: как электрическое поле $E = -(1/c)(\partial A/\partial t) - \nabla\varphi$ и как поперечная часть вектор-потенциала $(A_l - (q_l q_{l'}/q^2) A_{l'})$.

Следя за тем, чтобы преобразование (228) действительно приводило к компенсации фазы параметра порядка на всех этапах вычислений, мы приходим к вполне определённой связи фазы параметра порядка с внешним полем как следствие требования калибровочной инвариантности системы в произвольных полях. Поэтому такой подход, основанный на уравнении самосогласования (230), оказывается эквивалентным наложению условия непрерывности тока, использованному Амбегаокаром и Кадановым [44]. Заметим, что, хотя в рамках температурной техники правильные ответы в конце концов были получены, последовательный вывод формул линейного отклика для сверхпроводника при наличии существенно зависящей от времени величины — фазы параметра порядка — гораздо проще и логичнее выглядит в рамках НДТ.

9. Туннельные системы

Если в задачах отклика необходимо найти изменения матрицы плотности какой-то системы (часто однородной) под действием внешнего поля, то туннельные системы представляют собой задачу другого рода. В таких системах мы имеем дело по крайней мере с тремя подсистемами: два берега контакта и некоторая область между ними (рис. 22). При этом берега контакта представляют собой два различных термостата с разными химическими потенциалами и, возможно, разной температурой.

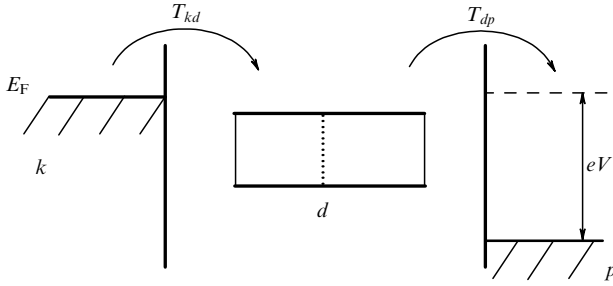


Рис. 22. Общая схема туннельной системы.

В качестве возмущения рассматривается не приложенное к такому контакту напряжение, а появление переходов между подсистемами, обусловленное туннельными матричными элементами. С этой точки зрения исходно матрица плотности всей системы является произведением начальных (равновесных) матриц плотности для левого, правого берегов и промежуточной подсистемы

$$\rho_0 = \rho_L^0 \times \rho_d^0 \times \rho_R^0. \quad (236)$$

При появлении переходов между подсистемами матрица плотности всей системы начинает меняться и не может быть записана как произведение трёх независимых матриц плотности. Такая задача об изменении матрицы плотности сложной системы может быть последовательно рассмотрена только в рамках НДТ. Одно из первых последовательных описаний туннельных задач в рамках НДТ было дано в работах [3–5].

9.1. Общие формулы для туннельного тока

Некоторые общие формулы для туннельного тока могут быть получены даже без конкретизации свойств промежуточной системы. При этом предполагается, что берега контакта описываются гамильтонианами свободных частиц с раздвинутыми на величину приложенного напряжения eV химическими потенциалами:

$$\hat{H}_0 = \sum_k (\epsilon_k - \mu) c_k^+ c_k + \sum_p (\epsilon_p - \mu - eV) c_p^+ c_p + \hat{H}_d, \quad (237)$$

где c_k — электронный оператор левого берега, c_p — правого, а часть $\hat{H}_d$ описывает изолированную промежуточную систему (со всеми возможными взаимодействиями). В качестве возмущения рассматривается туннельный гамильтониан, описывающий переходы между левым и правым берегом и промежуточной системой:

$$H_{\text{tun}} = T_L \sum_{k,i} (c_k^+ d_i + d_i^+ c_k) + T_R \sum_{p,i} (c_p^+ d_i + d_i^+ c_p), \quad (238)$$

здесь d_i — оператор уничтожения частицы в i -м состоянии промежуточной системы, T_L , T_R — туннельные матричные элементы, связывающие промежуточную систему с левым и правым берегом.

В первую очередь нас интересует вычисление тока при заданном напряжении на контакте. Оператор тока из левого берега в промежуточную систему находится стандартным образом из уравнения непрерывности, определяющего изменение числа частиц в левом берегу:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_L = -i[n_L, H_T] = \hat{I}_L. \quad (239)$$

$$\frac{d}{-} \xrightarrow{+} \frac{k}{+} = \frac{d}{-} \xrightarrow{\times} \frac{T_L}{-} \frac{k}{-} \xrightarrow{+} + \frac{d}{-} \xrightarrow{\times} \frac{T_L}{+} \frac{k}{+} \xrightarrow{+}$$

Рис. 23. Диаграммы, определяющие функцию G_{dk} в туннельных задачах. T_L — матричный элемент туннелирования между берегом контакта и промежуточной системой.

Его явный вид:

$$\hat{I}_L = iT_L \sum_k (c_k^+ d - d^+ c_k). \quad (240)$$

Точно такое же выражение может быть записано для тока из промежуточной системы в правый берег, однако для стационарных условий эти токи будут равны (в чём, конечно, можно в каждом конкретном случае убедиться и непосредственным вычислением). Поэтому рассмотрим ток только с одной стороны. Среднее от оператора тока может быть выражено через функции Грина НДТ:

$$I_L = iT_L \sum_k (\langle c_k^+ d \rangle - \langle d^+ c_k \rangle), \quad (241)$$

$$\langle c_k^+ d \rangle = \langle c_k^+(t^-) d(t^+) \rangle = G_{dk}^<(t, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{dk}^<(\omega). \quad (242)$$

Для стационарного случая:

$$I = \sum_k T_{kd} \int \frac{d\omega}{2\pi} (G_{kd}^<(\omega) - G_{dk}^<(\omega)). \quad (243)$$

Функции Грина $G_{dk}^<$ определяются диаграммами на рис. 23. Если, кроме одночастичных переходов, между левым берегом и промежуточной системой нет никакого другого взаимодействия, то показанное на рис. 23 выражение является не поправкой первого порядка по туннельному матричному элементу, а точным уравнением Дайсона.

При этом функции G_k соответствуют исходным функциям Грина левого берега, а функции G_d — точные, с учётом как всех переходов в берега контакта, так и всех взаимодействий внутри промежуточной системы:

$$G_{dk}^<(t, t) = T_L \int dt_1 [G_d^R(t, t_1) G_k^{0<}(t_1, t) + G_d^<(t, t_1) G_k^{0A}(t_1, t)]. \quad (244)$$

Используя явный вид функции Грина левого берега,

$$I(V) = 2T_L T_L^* \sum_k \int \text{Im} G_k^{R0}(\omega) \times \\ \times [2 \text{Im} G_d^A(\omega) n_k^0(\omega) - i G_d^<(\omega)] \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (245)$$

Эта формула верна и в том случае, если внутри промежуточной системы есть электрон-электронное или электрон-фононное взаимодействие. На языке НДТ она была, видимо, впервые получена в работе [6]. В написанной в таком виде формуле для тока трудно увидеть симметрию по отношению к левому и правому берегу контакта. Эта симметрия восстанавливается в явном виде только после того, как будут определены точные функции Грина G_d^R и $G_d^<$. (Заметим, что во взаимодействующей системе используемые для получения точной функции Грина G_d приближения должны удовлетворять соответствующим тождествам Уорда, т.е. быть согласованными, иначе, стартуя с формул для тока из левого или

$$\xrightarrow{d} = \xrightarrow{d} \xrightarrow{T_L} \text{X} - \text{X} \xrightarrow{k} \xrightarrow{T_L} \text{X} \xrightarrow{d} + \xrightarrow{d} \xrightarrow{T_R} \text{X} - \text{X} \xrightarrow{p} \xrightarrow{T_R} \text{X} \xrightarrow{d}$$

Рис. 24. Графический вид уравнения Дайсона для функции промежуточной системы G_d в отсутствие взаимодействия внутри промежуточной системы.

правого берега контакта, можно получить разные ответы для тока!

Если в промежуточной системе нет взаимодействия между частицами, то точная функция Грина G_d удовлетворяет простому уравнению Дайсона, графически показанному на рис. 24.

После решения этого матричного уравнения НДТ и подстановки полученных точных функций G_d^R и $G_d^<$ в выражение (245) формула для тока упрощается до стандартной формулы Ландауэра, явно симметричной по отношению к левому и правому берегу контакта:

$$I(V) = \int 4\gamma_L\gamma_R G_d^A(\omega) G_d^R(\omega) [n_L^0(\omega) - n_R^0(\omega)] \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (246)$$

где введены стандартные скорости туннельных переходов:

$$\gamma_{L,R} = \pi |T_{L,R}|^2 v_{L,R}, \quad (247)$$

$v_{L,R}$ — плотность состояний в левом (правом) берегу, $n_{L,R}^0(\omega)$ — фермиевские функции распределения в левом (правом) берегу.

Заметим, что если туннелирование происходит через один изолированный электронный уровень (как на рис. 25), т.е. гамильтониан промежуточной системы в (237) равен

$$\hat{H}_d = \varepsilon_1 d^\dagger d, \quad (248)$$

то $G_d^R(\omega) = 1/(\omega - \varepsilon_1 + i(\gamma_L + \gamma_R))$ и формула для тока (246) принимает характерный для резонансного туннелирования вид:

$$I(V) = \int \frac{4\gamma_L\gamma_R}{(\omega - \varepsilon_1)^2 + (\gamma_L + \gamma_R)^2} [n_L^0(\omega) - n_R^0(\omega)] \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (249)$$

Хотя эта формула может быть получена вычислением коэффициента прохождения и применением температурной диаграммной техники, даже в этом случае вычисление функции $G_d^<$ из уравнения Дайсона (см. рис. 24) даёт неравновесную функцию распределения электронов в

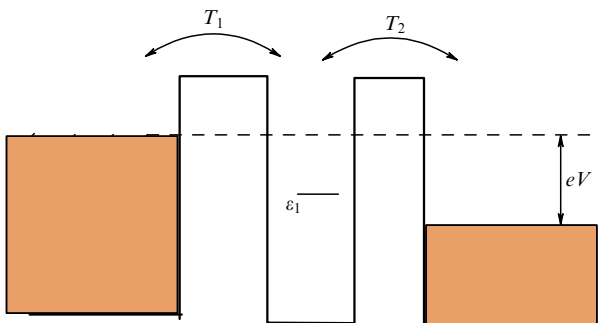


Рис. 25. Туннельная система с резонансным электронным уровнем.

промежуточной системе, которую из температурной техники получить невозможно:

$$n_d(\omega) = \frac{\gamma_L n_L^0(\omega) + \gamma_R n_R^0(\omega)}{\gamma_L + \gamma_R}. \quad (250)$$

Точно такая же двухступенчатая неравновесная функция распределения появляется в баллистических контактах, длина которых меньше характерной длины рассеяния. Наличие таких существенно неравновесных распределений становится важным, когда требуется учесть электрон-фононное или электрон-электронное взаимодействие в области контакта.

В нестационарном случае, когда приложенное к контакту напряжение или какие-либо параметры системы зависят от времени, НДТ является единственным методом, который позволяет последовательно вывести формулы для тока. Вычисления становятся более сложными, однако схема вычислений остаётся такой же [45].

9.2. Флуктуации (шумы) туннельного тока

Вычисление спектра шумов или флуктуаций тока в туннельных контактах является примером, где использование НДТ позволяет просто получить самые общие выражения, описывающие как дробовой, так и тепловой найквистовский шум единым образом. Мы продемонстрируем это на туннельном контакте, в котором туннелирование происходит через дискретные электронные уровни промежуточной системы. Это может быть квантовая точка, молекула в СТМ и т.д.

Такой контакт изображён на рис. 25, где для простоты показан только один дискретный электронный уровень.

Гамильтониан такой туннельной системы имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \varepsilon_1 a_1^\dagger a_1 + \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + T_L \sum_k (c_k^\dagger a_1 + a_1^\dagger c_k) + \\ & + \sum_p \varepsilon_p c_p^\dagger c_p + T_R \sum_p (c_p^\dagger a_1 + a_1^\dagger c_p). \end{aligned} \quad (251)$$

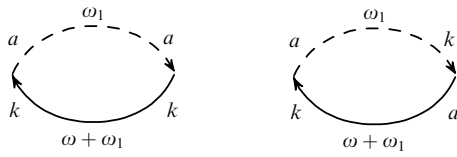
Ток через левый и правый барьеры определяется формулами (240), (241) (здесь явно выписан заряд электрона e):

$$\hat{I}_L = ieT_L(a_1^\dagger c_k - c_k^\dagger a_1), \quad \hat{I}_R = ieT_R(a_1^\dagger c_p - c_p^\dagger a_1). \quad (252)$$

В стационарном режиме ток из левого берега в промежуточную систему и из неё в правый берег одинаковы: $I_L = \langle \hat{I}_L \rangle = -\langle \hat{I}_R \rangle = -I_R$. Однако даже при протекании постоянного среднего тока флуктуации тока будут разными в разных частях системы: $S_{LL}(\omega) \equiv \langle I_L^2 \rangle_\omega \neq \langle I_R^2 \rangle_\omega \equiv S_{RR}(\omega)$. Можно показать, что из уравнения сохранения заряда вытекает, что флуктуации тока на нулевой частоте в стационарном режиме должны быть одинаковыми во всей системе: $S_{LL}(0) = -S_{RL} = -S_{LR} = S_{RR}$. Интересуясь мощностью шума только на нулевой частоте, достаточно вычислить один из этих корреляторов тока, например:

$$\begin{aligned} S_{LL}(t) = \langle \hat{I}_L(t) \hat{I}_L(0) \rangle = \\ = -e^2 T_L^2 \langle (a_1^\dagger c_k(t) - c_k^\dagger a_1(t)) (a_1^\dagger c_k(0) - c_k^\dagger a_1(0)) \rangle. \end{aligned} \quad (253)$$

С точки зрения методов НДТ такой коррелятор соответствует диаграммам, показанным на рис. 26.

Рис. 26. Диаграммы, определяющие коррелятор $S_{LL}(\omega)$.

В фурье-представлении коррелятор задаётся таким выражением:

$$S_{LL}(\omega) = e^2 T_L^2 \sum_k \int \frac{d\omega_1}{2\pi} [G_{aa}^<(\omega_1) G_{kk}^>(\omega + \omega_1) + G_{kk}^<(\omega_1) G_{aa}^>(\omega + \omega_1) - G_{ak}^<(\omega_1) G_{ak}^>(\omega + \omega_1) - G_{ka}^<(\omega_1) G_{ka}^>(\omega + \omega_1)].$$

Его вычисление даёт окончательную формулу для флуктуаций тока:

$$S_{LL}(0) = e^2 \frac{4\gamma_L \gamma_R}{\gamma_L + \gamma_R} \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im } G_1^A(\omega) \left\{ [n_L(1 - n_R) + n_R(1 - n_L)] - \frac{4\gamma_L \gamma_R}{\gamma_L + \gamma_R} \text{Im } G_1^A(\omega) (n_L - n_R)^2 \right\}. \quad (254)$$

(Напомним, что $\gamma_L = T_L^2 v_k$, $\gamma_R = T_R^2 v_p$ — скорости туннельных переходов, $n_L = n(\omega)$, $n_R = n(\omega - eV)$.) Эта простая формула интересна тем, что в ней сразу содержатся и дробовой, и тепловой найквистовский шум. "Классический" найквистовский шум получится из формулы (254) в равновесном случае при равном нулю напряжении на контакте $V = 0$ следующим образом. При $V = 0$, $T \neq 0$ ($n_L - n_R = 0$), формула (254) выглядит так:

$$S_{LL}(0) = 4 \frac{\gamma_L \gamma_R}{\gamma_L + \gamma_R} \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im } G_1^A(\omega) [n_L(1 - n_R) + n_R(1 - n_L)]. \quad (255)$$

Если температура меньше характерных электронных энергий, например, ширины уровня $\gamma = \gamma_L + \gamma_R$, то

$$n(\omega)(1 - n(\omega)) = \frac{1}{4} \cosh^{-2} \left(\frac{\omega}{2T} \right) \simeq T \delta(\omega). \quad (256)$$

Тогда формула (254) сводится к формуле Найквиста:

$$S_{LL}(0) = 2Tg(0) = \frac{2T}{R_{\text{tun}}}, \quad (257)$$

где проводимость контакта (обратное туннельное сопротивление) определяется формулой

$$g(0) = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\gamma_L + \gamma_R} \frac{2}{\pi} \text{Im } G_1^A(0). \quad (258)$$

Чтобы получить привычное выражение для дробового шума, наоборот, рассмотрим $T \rightarrow 0$. При этом $n_L(1 - n_R) + n_R(1 - n_L) \simeq n_L - n_R$ и $(n_L - n_R)^2 \simeq n_L - n_R$. Поэтому шум оказывается пропорциональным туннельному току, как это и должно быть для дробового шума. Это легко увидеть, сравнивая формулу (254) для шума и формулу (249) для тока. Однако коэффициент пропорциональности между мощностью шума и током зависит от режима, в котором находится контакт. При малых напряжениях $V \ll \gamma$ получается известная формула, в

которой коэффициент прохождения через структуру определяет мощность шума [46, 47]:

$$S_{11} = eI(V) \left[1 - \frac{4\gamma_L \gamma_R}{\varepsilon_1^2 + (\gamma_L + \gamma_R)^2} \right] = eI(1 - T), \quad (259)$$

где

$$T = \frac{4\gamma_L \gamma_R}{\varepsilon_1^2 + (\gamma_L + \gamma_R)^2}$$

— коэффициент прохождения через такую резонансную туннельную структуру.

Мы видим, что флуктуации тока оказываются меньше по сравнению с обычным пуассоновским дробовым шумом, для которого $S(\omega \rightarrow 0) = eI$. Причём в случае полного резонанса, когда $\gamma_L = \gamma_R$ и $\varepsilon_1 = 0$, $T = 1$ и флуктуации тока вообще полностью подавлены. Интересно, что при больших напряжениях, когда $V \gg \varepsilon_1, \gamma$ мощность шума также пропорциональна току, но коэффициент при этом меняется:

$$S_{11} = eI \left[1 - \frac{2\gamma_L \gamma_R}{(\gamma_L + \gamma_R)^2} \right] \geq \frac{1}{2} eI. \quad (260)$$

Исследованию шумов в квантовых системах, атомных и молекулярных контактах методами НДТ посвящено довольно много работ (получить представление об этой области можно из сборника [48]). Особый интерес представляет случай неупругого туннелирования, когда есть взаимодействие с колебательными модами [49–52].

9.3. Возбуждение колебаний туннельным током

В любой системе есть взаимодействие электронов с колебательными модами. Поэтому протекание туннельного тока может сопровождаться возбуждением колебаний. Такое возбуждение колебаний может происходить в берегах контакта и определяться электрон-фононным взаимодействием в объёме этих материалов. Из-за этого эффекта на вольт-амперных характеристиках будут возникать характерные особенности, положение которых связано с частотами фононов (в качестве одной из первых работ укажем [53]).

Для таких малых объектов, как квантовые точки или даже отдельные молекулы, помещённых в область туннельного контакта, электрон-колебательное взаимодействие и возбуждение колебаний отличаются от случая массивных контактов. И для построения теории таких систем наиболее адекватным языком является НДТ. Среди первых работ, рассматривавших электрон-фононное взаимодействие с помощью НДТ, следует назвать работу [5]. К настоящему времени существует очень большое число работ, в которых рассматривается с использованием НДТ возбуждение колебаний туннельным током в молекулах, атомных цепочках и т.д. [54–60], некоторые аспекты туннелирования с возбуждением колебаний рассмотрены в обзоре [61]. Благодаря прогрессу экспериментальной техники эти теоретические результаты можно сравнить с экспериментом, например, с результатами исследований сканирующим туннельным микроскопом (СТМ) отдельных молекул на подложке.

Большая часть работ посвящена описанию того, какого вида особенности появляются на туннельных ха-

рактических при наличии электрон-колебательного взаимодействия.

В настоящем обзоре хотелось бы остановиться на другом аспекте такого взаимодействия — на расчёте интенсивности возбуждения колебаний туннельным током. Такая теория нужна, например, для оценки степени разогрева малых туннельных контактов. Кроме того, сейчас есть очень интересная область в СТМ-экспериментах по управлению диссоциацией, десорбцией, движением молекул и атомов по поверхности с помощью туннельного тока (см., например, [62]).

Суть таких расчётов в рамках НДТ выглядит очень просто. Поскольку степень возбуждения осциллятора (степень разогрева) на языке вторичного квантования определяется числом заполнения данной колебательной моды, то необходимо найти для данных параметров контакта функции Грина $D^<(t, t') = -i\langle b^+(t)b(t') \rangle$ (b^+ — оператор рождения кванта колебаний), откуда сразу же определяются неравновесные числа заполнения $N(t) = iD^<(t, t)$.

Из уравнения Дайсона для фононной функции Грина можно также перейти к кинетическим уравнениям, как это описано в разделе 5, и с их помощью рассматривать нестационарные эффекты, связанные с возбуждением колебаний.

Как работает такая схема расчёта, рассмотрим на простом примере системы с двумя дискретными электронными уровнями в промежуточной системе [63], показанной на рис. 27.

Гамильтониан такой системы состоит из трёх частей:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{dot}} + \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{tun}}. \quad (261)$$

Часть $\hat{H}_{\text{dot}}$ описывает квантовую точку или молекулу — промежуточную систему, в которой учтены только два электронных состояния (уровня); электрон-колебательное взаимодействие с одной колебательной модой приводит к возможности переходов между этими уровнями:

$$\hat{H}_{\text{dot}} = \sum_{i=1,2} \varepsilon_i a_i^+ a_i + g(a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1)(b + b^+) + \omega_0 b^+ b, \quad (262)$$

a_i — электронные операторы первого и второго состояния, b — оператор колебательной моды с частотой ω_0 , g — константа электрон-фононного взаимодействия. Здесь ε_i — энергии двух дискретных уровней в квантовой точке, и мы в дальнейшем будем считать, что уровень "1" лежит выше уровня "2": $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$.

Вторая часть в (261) — это правый и левый берег контакта, описываемые как системы невзаимодействующих частиц, химический потенциал для одного из берегов

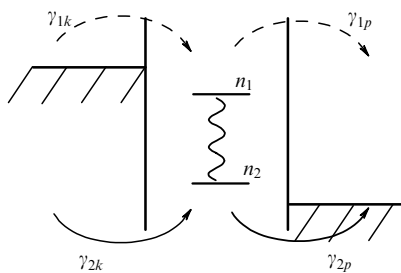


Рис. 27. Двухуровневая туннельная система с электрон-колебательным взаимодействием.



Рис. 28. Уравнение Дайсона для функции Грина колебательной моды.

сдвинут на величину приложенного напряжения eV :

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{p}} (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu - eV) c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}}. \quad (263)$$

Туннельный гамильтониан, как обычно, описывает переходы между берегами контакта и промежуточной системой:

$$\hat{H}_{\text{tun}} = \sum_{\mathbf{p}, i=1,2} T_{\mathbf{p},i} (c_{\mathbf{p}}^+ a_i + \text{h.c.}) + \sum_{\mathbf{k}, i=1,2} T_{\mathbf{k},i} (c_{\mathbf{k}}^+ a_i + \text{h.c.}). \quad (264)$$

Диаграммная техника для неравновесных процессов позволяет написать уравнение Дайсона с неприводимой частью первого порядка (рис. 28), из которого могут быть найдены все фононные функции Грина — Келдыша.

В треугольном представлении НДТ (75), (93) это матричное уравнение Дайсона даст такую систему уравнений:

$$\hat{D}^< = \hat{D}_0^< + \hat{D}_0^< \Pi^A \hat{D}^A + \hat{D}_0^R \Pi^< \hat{D}^A + \hat{D}_0^R \Pi^R \hat{D}^<, \quad (265)$$

$$\hat{D}^R = \hat{D}_0^R + \hat{D}_0^R \Pi^R \hat{D}^R, \quad (266)$$

где D_0 — равновесная функция Грина:

$$D_0^R(\Omega) = \frac{2\omega_0}{(\Omega + i\delta)^2 - \omega_0^2}, \quad (267)$$

$$D_0^<(\Omega) = N_0(\Omega)(D_0^R(\Omega) - D_0^A(\Omega)),$$

N_0 — распределение Бозе.

Неприводимые части (поляризационные операторы) в низшем порядке по электрон-фононному взаимодействию (первый порядок по g^2), изображённые в виде петель из двух электронных функций Грина на рис. 28, легко выписываются:

$$\begin{aligned} \Pi^A(\Omega) - \Pi^R(\Omega) = & -4ig^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} [\text{Im } G_2^A(\omega) \text{Im } G_1^A(\omega - \Omega)(n_2(\omega) - n_1(\omega - \Omega)) + \\ & + \text{Im } G_1^A(\omega) \text{Im } G_2^A(\omega - \Omega)(n_1(\omega) - n_2(\omega - \Omega))], \end{aligned} \quad (268)$$

$$\begin{aligned} \Pi^<(\Omega) = & -4ig^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} [n_1(\omega)(n_2(\omega - \Omega) - 1) \text{Im } G_1^A(\omega) \text{Im } G_2^A(\omega - \Omega) + \\ & + n_2(\omega)(n_1(\omega - \Omega) - 1) \text{Im } G_2^A(\omega) \text{Im } G_1^A(\omega - \Omega)]. \end{aligned}$$

В данном случае теория возмущений строится по электрон-фононному взаимодействию, в предположении, что туннельная задача без учёта этого взаимодействия уже точно решена. Поэтому все электронные функции Грина в формулах (268) определены точно для туннельной задачи. Напомним, что входящие в эти функции неравновесные электронные числа заполнения n_1, n_2 определяются туннельными процессами (250): $n_i(\omega) = (\gamma_i^p n_p^0(\omega) + \gamma_i^k n_k^0(\omega)) / \gamma_i$. Скорости туннельных переходов γ определяются, как обычно, туннельными матрич-

ными элементами $T_{k,(p),i}$ и плотностью состояний $v_{k,p}$ в берегах контакта: $\gamma_i^k = \pi T_{k,i}^2 v_k$, $\gamma_i^p = \pi T_{p,i}^2 v_p$. Здесь и далее полное уширение дискретных уровней за счёт гибридизации с берегами будет обозначаться как $\gamma_i = \gamma_i^p + \gamma_i^k$.

Решение уравнения Дайсона в таком виде, в котором появляются неравновесные функции распределения, было выписано в общем виде в разделе 4 (121), (122):

$$D^< = -2 \frac{\Pi^<}{2 \operatorname{Im} \Pi^R} \operatorname{Im} D^R. \quad (269)$$

Тем самым неравновесное число заполнения колебательной моды даётся простым выражением:

$$N(\Omega) = \frac{i\Pi^<(\Omega)}{2 \operatorname{Im} \Pi^R(\Omega)}. \quad (270)$$

(Сейчас речь идёт о стационарной ситуации, когда напряжение на контакте не меняется со временем и устанавливается неравновесное, но стационарное заполнение колебательной моды.)

Из явного вида неприводимой части $\Pi^<$ следует, что она может быть разбита на два слагаемых:

$$i\Pi^<(\Omega) = 2 \operatorname{Im} \Pi^R(\Omega) N_0(\Omega) + P^<(\Omega), \quad (271)$$

где явный вид функции $P^<$ приведён ниже. Тогда

$$N(\Omega) = N_0(\Omega) + \Delta N(\Omega), \quad \Delta N(\Omega) = \frac{P^<(\Omega)}{2 \operatorname{Im} \Pi^R(\Omega)}, \quad (272)$$

где первый член есть просто равновесная бозевская функция распределения для фононной моды, находящейся в равновесии с электронным термостатом (берега контакта), а второй описывает собственно неравновесные эффекты, связанные с протеканием туннельного тока и обращается в нуль при отсутствии напряжения на контакте.

Заметим, что полученное неравновесное распределение обладает важным свойством симметрии, которое легко проверяется с помощью формул (268) для поляризационных операторов: $N(\Omega) = -N(-\Omega) - 1$, причём неравновесная добавка $\Delta N(\Omega) = -\Delta N(-\Omega)$. То есть неравновесная функция распределения обладает теми же свойствами, что и равновесная функция Бозе. Это свойство тесно связано с тем фактом, что неравновесное распределение также является решением кинетического уравнения, обращающим в нуль интеграл столкновений, следующий из интегрального уравнения Дайсона (265). Однако из самого кинетического уравнения можно установить только, что распределение должно обладать

указанным свойством, но найти конкретный вид стационарного распределения невозможно.

Подставляя в уравнение (268) вместо чисел заполнения n_1, n_2 их явные выражения через равновесные ферми-распределения в берегах n_p и n_k , мы получим:

$$\begin{aligned} P^<(\Omega) = & \frac{-4g^2}{\gamma_1 \gamma_2} \int \frac{d\omega}{2\pi} (n_p^0(\omega - \Omega) - n_k^0(\omega - \Omega)) \times \\ & \times \left[\operatorname{Im} G_1^R(\omega) \operatorname{Im} G_2^R(\omega - \Omega) \times \right. \\ & \times (\gamma_1^k \gamma_2^p n_k^0(\omega) - \gamma_2^k \gamma_1^p n_p^0(\omega) + (\gamma_1^k \gamma_2^p - \gamma_2^k \gamma_1^p) N_0(\Omega)) + \\ & + \operatorname{Im} G_1^R(\omega - \Omega) \operatorname{Im} G_2^R(\omega) \times \\ & \times (\gamma_2^k \gamma_1^p n_k^0(\omega) - \gamma_1^k \gamma_2^p n_p^0(\omega) - (\gamma_1^k \gamma_2^p - \gamma_2^k \gamma_1^p) N_0(\Omega)) \left. \right], \end{aligned} \quad (273)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \Pi^A = & \frac{-2g^2}{\gamma_1 \gamma_2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[\operatorname{Im} G_1^A(\omega) \operatorname{Im} G_2^A(\omega - \Omega) \times \right. \\ & \times (\gamma_1^k \gamma_2^p (n_k^0(\omega) - n_k^0(\omega - \Omega)) + \gamma_2^k \gamma_1^p (n_p^0(\omega) - n_p^0(\omega - \Omega)) + \\ & + (\gamma_1^k \gamma_2^p - \gamma_2^k \gamma_1^p) (n_k^0(\omega - \Omega) - n_p^0(\omega - \Omega))) + \\ & + \operatorname{Im} G_1^A(\omega - \Omega) \operatorname{Im} G_2^A(\omega) (\gamma_2^k \gamma_1^p (n_k^0(\omega) - n_k^0(\omega - \Omega)) + \\ & + \gamma_1^k \gamma_2^p (n_p^0(\omega) - n_p^0(\omega - \Omega)) - \\ & \left. - (\gamma_1^k \gamma_2^p - \gamma_2^k \gamma_1^p) (n_k^0(\omega - \Omega) - n_p^0(\omega - \Omega))) \right]. \end{aligned} \quad (274)$$

Знак комбинации туннельных скоростей $(\gamma_1^k \gamma_2^p - \gamma_2^k \gamma_1^p)$, появившейся в формулах (274), определяет относительную заселённость двух электронных состояний в условиях протекания туннельного тока:

$$\frac{\gamma_1^k \gamma_2^p - \gamma_2^k \gamma_1^p}{\gamma_1 \gamma_2} (n_k^0(\omega) - n_p^0(\omega)) = n_1(\omega) - n_2(\omega). \quad (275)$$

Процессы фононной генерации протекают совершенно по-разному в зависимости от того, какой случай реализуется в системе: случай "нормальной" заселённости уровней ($n_1(\omega) - n_2(\omega) < 0$) или "инверсной" заселённости ($n_1(\omega) - n_2(\omega) > 0$) (напомним, что $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$). На рисунках 29 и 30 показаны зависимости неравновесной заселённости колебательной моды и мощности генерации фононов от напряжения для такого расположения электронных уровней, как на рис. 27. Приложенный к правому берегу положительный потенциал понижает уровень Ферми электронов так, что он сначала пересекает уровень ε_1 , а потом ε_2 .

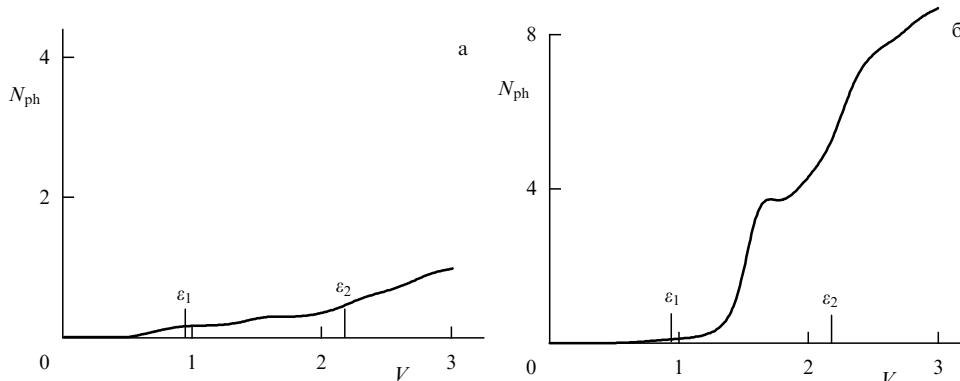


Рис. 29. Слабое (а) и сильное (б) возбуждение колебаний. Положение электронных уровней показано вертикальными метками, частота колебаний $\omega_0 = 0,5$. (а) $\gamma_1^k \gamma_2^p < \gamma_2^k \gamma_1^p$, (б) $\gamma_1^k \gamma_2^p > \gamma_2^k \gamma_1^p$.

В случае нормальной заселённости интенсивность излучения фононов в системе мала. В этом режиме максимальные значения неравновесных чисел заполнения не превышают нескольких единиц (рис. 29а).

Совершенно по-другому развивается генерация фононов в случае появления инверсной заселённости двух уровней при протекании тока. В этом случае возбуждение колебаний гораздо сильнее, что показано на рис. 29б (вертикальные шкалы левого и правого рисунков отличаются в два раза). Более того, при определённом значении приложенного напряжения генерация резко усиливается, так что числа заполнения фононных состояний, определяемые по формуле (272), расходятся до бесконечности. На рисунке 29 показан только начальный участок зависимости до достижения порога. Такая расходимость неравновесных фононных чисел заполнения возникает из-за того, что функция $\text{Im } P^A$, определяемая (274), при некотором конечном напряжении на контакте проходит через нуль, меняя знак с положительного на отрицательный. Этот эффект очень похож на развитие лазерной генерации при появлении инверсной заселённости уровней в системе. Для того чтобы корректно описать возбуждение колебательной подсистемы в этом случае, необходимо либо строить теорию более высоких порядков по электрон-фононному взаимодействию [63], либо учесть другие каналы релаксации колебаний.

Мы видим, что методы НДТ позволяют понять, при каких условиях возбуждение колебаний в туннельных системах будет сильным, а при каких слабым. Знание этой информации даёт возможность регулировать интенсивность излучения фононов в тех системах, в которых можно менять параметры туннельного контакта. Для квантовых ям это может достигаться как изготовлением ям специальной формы, так и управлением внешним электрическим полем формой потенциала ямы. Для молекул можно подстраивать туннельный микроскоп, увеличивая или уменьшая туннельную связь между иглой СТМ и молекулой.

Теория показывает, что при создании туннельным током в системе с дискретными уровнями инверсной заселённости должна сильно расти генерация фононов (колебаний). Проблема подавления этой генерации очень существенна для создания полупроводниковых каскадных лазеров, основанных на системе туннельных переходов. Возникновение оптической генерации требует создания инверсной заселённости уровней, но, как показано в этом разделе, одновременно неминуемо развивается и генерация фононов, что мешает оптическому излучению. Анализ в рамках НДТ, подобный приведённому в данном разделе, позволяет оценить, можно ли достичь оптической генерации и как можно изменить параметры туннельных переходов для достижения необходимых свойств системы.

Кроме того, в формализме НДТ очень легко проследить роль температурных эффектов, так как общие формулы верны при любой температуре. В данной задаче температура входит в функции распределения электронов в берегах контакта.

Если уход неравновесных фононов из области контакта происходит достаточно быстро и реального увеличения фононных (колебательных) чисел заполнения не происходит, то формулы (272), (265) могут служить для определения интенсивности (мощности) излучения фононов на контакте.

Физическим условиям во многих случаях может больше отвечать ситуация, когда либо неравновесные фононы быстро уходят из области контакта, либо существуют быстрые каналы релаксации колебательных мод, которые трудно учесть точно. Не рассматривая подробно все механизмы такой быстрой релаксации (самый простой — баллистический уход в системах с хорошей теплопроводностью), на языке уравнений НДТ такую релаксацию можно учесть, добавив в правую часть кинетического уравнения, получающегося из уравнения Дайсона (265) (см. (133)) релаксационный член:

$$i \frac{\Omega}{\omega_0} \frac{\partial}{\partial t} D^<(\Omega, t) = (PD)^< - (DP)^< - \Gamma(D^< - D_0^<). \quad (276)$$

Появление такого релаксационного члена $\mathcal{R} = -\Gamma(D^< - D_0^<)$ с большой константой Γ означает, что неравновесные функции Грина фононов в условиях баланса между накачкой и релаксацией будут мало отличаться от исходных равновесных. Это позволяет найти из уравнения (276) формулы для мощности генерации фононов (колебаний) туннельным током, вычисляя правую часть этих уравнений с помощью исходных "нулевых" функций Грина и не зная деталей релаксации.

Поскольку $\text{Im } D^R$ практически всегда имеет острый пик на частоте фонона ω_0 :

$$i \int \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{\Omega}{\omega_0} D^<(\Omega, t) \approx - \int \frac{d\Omega}{2\pi} \text{Im } D^R(\Omega) N_{\omega_0}(t, \Omega) = N_{\omega_0}(t), \quad (277)$$

тогда, интегрируя левую и правую части уравнения (276), мы получим уравнение баланса для числа колебательных квантов:

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{\omega_0}(t) = \int \frac{d\Omega}{2\pi} [(PD)^< - (DP)^<] = W - \Gamma(N_{\omega_0}(t) - N_0). \quad (278)$$

Из вида уравнения (278) следует, что интенсивность генерации фононов определяется как

$$W = \int \frac{d\Omega}{2\pi} [(PD)^< - (DP)^<] = \int \frac{d\Omega}{2\pi} [D^<(\Pi^R - \Pi^A) - \Pi^<(D^R - D^A)]. \quad (279)$$

Используя разделение (271) для мощности генерации, получим очень простой ответ:

$$W = P^<(\omega_0). \quad (280)$$

Это выражение можно, однако, переписать и в другом виде:

$$W = \int \frac{d\Omega}{\pi} \text{Im } D^R(\Omega) \mathcal{G}(\Omega) \Delta N(\Omega) \approx -\mathcal{G}(\omega_0) \Delta N(\omega_0), \quad (281)$$

где появляется эффективная скорость генерации $\mathcal{G} = 2 \text{Im } \Pi^R$ и "неравновесная добавка" к равновесному числу заполнения $\Delta N(\omega_0) = i\Pi^</2 \text{Im } \Pi^R$. Это именно тот неравновесный уровень возбуждения, который вычислялся выше, т.е. до таких чисел заполнения стремилось бы дойти возбуждение моды за счёт туннельного тока, если бы не быстрая релаксация колебаний за счёт других механизмов. Значениями этих функций на частоте, равной частоте фонона ω_0 , и определяется интенсивность генерации.

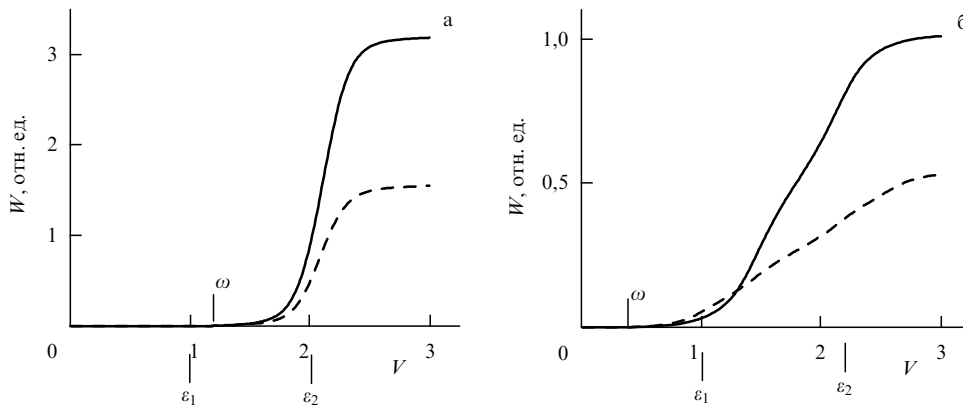


Рис. 30. Зависимость мощности генерации колебаний туннельным током от напряжения. Сплошная линия — нулевая температура, штриховая — $T = 0,2\omega_0$. Положение электронных уровней отмечено вертикальными метками.

Для двухуровневой модели по формуле (273) легко получить зависимость интенсивности возбуждения колебаний от приложенного напряжения при различных соотношениях между положением электронных уровней и частотой колебаний. Примеры показаны на рис. 30. Заметим, что в изолированной системе реальные переходы были бы возможны только с $\omega_0 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, но в открытой туннельной системе частота возбуждаемых колебаний может быть любой по сравнению разностью электронных энергий $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$. Однако напряжение, с которого начинается заметная генерация, и характер нарастания интенсивности с напряжением зависят от соотношения между ω_0 и $\varepsilon_1, \varepsilon_2$. Мы видим также, что рост температуры существенно понижает интенсивность генерации.

Задачи о возбуждении туннельным током определённых колебательных мод для молекул, адсорбированных на поверхности, вызывают сейчас большой интерес, так как позволяют объяснить механизмы и характерные зависимости для экспериментально наблюдаемых явлений: индуцированных током десорбции, диссоциации и контролируемого перемещения молекул на поверхности из одного положения в другое (см., например, [62]). Также активно исследуются контакты из тонких проводочек и даже монокристаллических цепочек. Для расчёта тока с учётом возбуждения колебаний в таких системах стали применять сочетание численных методов функционала плотности и НДТ [64–66].

9.4. Туннельные задачи в подходе эффективной массы

Обычно знакомство с туннельными задачами в квантовой механике начинается с решения одномерных задач о прохождении электрона через потенциальный барьер. Для ряда систем, например, полупроводниковых планарных гетероструктур, сверхрешёток и т.д., удобно использовать общий формализм НДТ как раз в таком "континуальном" виде, опирающемся на приближение эффективной массы, в котором очень легко проследить связь с языком коэффициентов прохождения и отражения электрона (свободного) на барьере.

Посмотрим, как в таком "континуальном" представлении выглядят функции Грина НДТ. Для однородного полупроводника или металла функции Грина имеют простой вид в импульсном представлении:

$$G^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(k) + i\gamma}, \quad (282)$$

$$G^<(k, \omega) = 2in(\omega)\delta(\omega - \varepsilon(k)) \quad (283)$$

(γ здесь — бесконечно малая добавка). Для решения задач о туннельном прохождении электрона через планарные структуры удобно пользоваться функциями Грина в смешанном представлении, когда в плоскости, параллельной границам раздела, проведён переход к импульсному представлению, но оставлена явная зависимость всех функций от координаты вдоль оси, перпендикулярной к границам. Эту ось будем считать осью z . Уравнение, в символическом общем виде записываемое как

$$G_R^{-1}G^R = 1,$$

для случая квадратичного спектра $\varepsilon(k) = k^2/2m$ выглядит в разных представлениях следующим образом ($\hbar = 1$ здесь и далее):

$$(\omega - \varepsilon(k))G^R(k, \omega) = 1, \quad (284)$$

$$\left(\frac{1}{2m}\Delta + \omega\right)G^R(r, r', \omega) = \delta(r - r'), \quad (285)$$

$$\left[\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega - \frac{p^2}{2m} + i\gamma\right]G^R(z, z', p, \omega) = \delta(z - z'). \quad (286)$$

В последнем уравнении бесконечно малая мнимая часть выписана в явном виде, так как она обеспечивает однозначный выбор решения этого уравнения. Введём обозначение

$$\kappa = \sqrt{2m(\omega + i\gamma) - p^2} \quad (287)$$

и выберем ветвь корня с $\text{Im } \kappa > 0$. (Это соглашение будет действовать для всех корней такого вида.) Тогда существует единственное решение уравнения (286), конечное при $|z - z'| \rightarrow \infty$:

$$G^R(z, z', p, \omega) = \frac{\exp(i\kappa|z - z'|)}{i\kappa} m. \quad (288)$$

Опережающая функция всегда связана с запаздывающей соотношением типа: $G^A(z, z', p, \omega) = [G^R(z', z, p, \omega)]^*$. Поэтому

$$G^A(z, z', p, \omega) = \frac{\exp(-i\kappa^*|z - z'|)}{-i\kappa^*} m. \quad (289)$$

Для функции $G^<$ имеем соотношение:

$$G^<(z, z', p, \omega) = n(\omega) [G^A(z, z', p, \omega) - G^R(z, z', p, \omega)] = \\ = in(\omega) \left[\frac{\exp(i\kappa|z - z'|)}{\kappa} + \frac{\exp(-i\kappa^*|z - z'|)}{\kappa^*} \right] m, \quad (290)$$

при этом функция $G^<$ при совпадающих аргументах, определяющая плотность электронов, равна (см. (287)):

$$G^<(0, 0, p, \omega) = in(\omega) \frac{\kappa^* + \kappa}{|\kappa|^2} m = \\ = \begin{cases} \frac{in(\omega)}{\kappa} m & \text{при } \frac{p^2}{2m} < \omega, \\ 0 & \text{при } \frac{p^2}{2m} > \omega. \end{cases} \quad (291)$$

Такая форма для $G^<$ для свободного электронного газа сразу следует из соотношения $G^<(k, \omega) = n(\omega)(G^A(k, \omega) - G^R(k, \omega))$. Однако это же выражение можно получить из более общих выражений келдышевской техники следующим образом. Введём небольшое рассеяние электронов на случайных примесях. Неприводимая часть, соответствующая такому взаимодействию, вычисляется обычным образом:

$$\Sigma^R(\omega) = \sum_k V^2 G^R(k, \omega) = -i\gamma, \quad (292)$$

$$\Sigma^R(z, z', \omega) = -i\gamma \delta(z - z'), \quad (293)$$

$$\Sigma^<(\omega) = \sum_k V^2 G^<(k, \omega) = 2i\gamma n(\omega), \quad (294)$$

$$\Sigma^<(z, z', \omega) = 2i\gamma n(\omega) \delta(z - z'), \quad (295)$$

где V — матричный элемент потенциала рассеяния на примеси, $\gamma = \pi V^2 n_F$.

Такие выражения можно рассматривать двояким образом: можно считать появление таких Σ следствием рассеяния на примесях, и тогда в качестве $n(\omega)$ выступают числа заполнения для нашей электронной системы, которые постулируются равновесными фермиевскими функциями для заданного потенциала. Но точно такие же неприводимые части появляются, если есть переход электронов в термостат и обратно со случайными в пространстве амплитудами перехода. Тогда $n(\omega)$ есть термостатная равновесная функция распределения электронов. Такой приём позволяет ввести разный потенциал и разную температуру для левого и правого берега, "заложённые" в числа заполнения $n(\omega)$ соответствующих $\Sigma^<$. Если отодвинуть область взаимодействия с термостатом (т.е. область, в которой считаются заданными неприводимые части (292)–(295)) на некоторое расстояние от туннельной структуры (рис. 31), то такой метод позволит определять неравновесные числа заполнения во всей области контакта. Изображённая на рис. 31 схема позволяет моделировать контакты самых разных типов: термостатные области, в которых считается всегда заданным равновесное распределение Гиббса, — это массивные части контакта, в которых считаются заданными температура и потенциал, а в промежуточной области решение уравнений НДТ (иногда приближённое) позволяет найти все неравновесные характеристики в переходной области контакта.

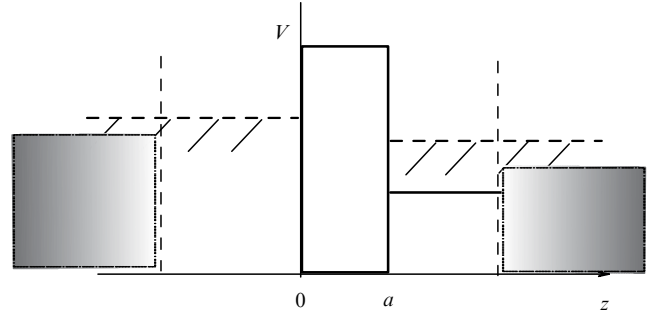


Рис. 31. Схема туннельной системы с областями вне контакта, которые рассматриваются как термостаты.

Функция $G^<$ может быть найдена по общей формуле неравновесной техники $G^< = G^R \Sigma^< G^A$:

$$G^<(z, z', p, \omega) = \\ = \int dz_1 dz_2 G^R(z, z_1, p, \omega) \Sigma^<(z_1, z_2, p, \omega) G^A(z_2, z', p, \omega) = \\ = \int dz_1 G^R(z, z_1, p, \omega) 2i\gamma n(\omega) G^A(z_1, z', p, \omega) \quad (296)$$

или из эквивалентного дифференциального уравнения $(G_0^{-1} - \Sigma^R)G^< = \Sigma^< G^A$:

$$\left[\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega - \frac{p^2}{2m} + i\gamma \right] G^<(z, z', p, \omega) = \\ = 2i\gamma n(\omega) G^A(z, z', p, \omega). \quad (297)$$

Подставив в эти выражения (288) и (289), можно убедиться, что воспроизводится формула (290) для $G^<$, и γ теперь может быть не только бесконечно малой (как для идеального газа), но и конечной величиной, появившейся из-за рассеяния на примесях или взаимодействия с внешним термостатом.

Рассмотрим кратко, как связано точное решение о туннелировании через один барьер, найденное с помощью функций Грина первого раздела, с решением методом туннельного гамильтониана. Пусть у нас есть туннельная структура, изображённая на рис. 32.

Отсчёт энергии ведётся от дна зоны проводимости левого берега. Приложенное напряжение U входит в сдвиг химического потенциала в электронных функциях заполнения для областей слева и справа от барьера. Все величины, относящиеся к области слева от барьера, будем обозначать индексом "0", а все величины справа — индексом "1". Числа заполнения слева: $n_0(\omega) = n_F(\omega - \mu)$,

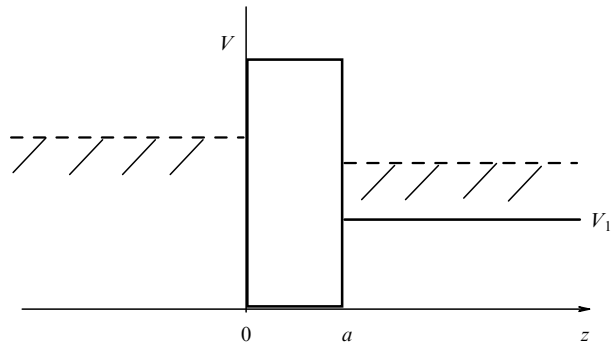


Рис. 32. Форма потенциала, задающего одномерную туннельную структуру.

справа: $n_1(\omega) = n_F(\omega - \mu - eU)$. Ось z направлена перпендикулярно слоям структуры, барьер расположен в области $0 < z < a$, a — толщина барьера.

Для такой формы потенциала точное решение дифференциальных уравнений для $G^R(z, z')$ типа уравнения (286) в каждой из областей с последующим сшиванием решений (должна быть непрерывна сама функция Грина по аргументам z , z' и её первая производная) даёт следующий ответ для $z' > a$ и $z < 0$:

$$G^R(z, z', p, \omega) = m \frac{-2q}{D} \exp[-i\kappa_0 z + i\kappa_1(z' - a)], \quad (298)$$

$$D = (q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0) \exp(qa) - (q + i\kappa_1)(q + i\kappa_0) \exp(-qa), \quad (299)$$

здесь

$$\begin{aligned} \kappa_0 &= \sqrt{2m(\omega + i\gamma) - p^2}, \\ \kappa_1 &= \sqrt{2m(\omega - V_1 + i\gamma) - p^2}, \\ q &= \sqrt{p^2 + 2m(V - \omega + i\delta)} \end{aligned} \quad (300)$$

(δ — бесконечно малая). Для простоты считается, что взаимодействие с термостатом (величина γ) одинаково слева и справа от барьера. Поскольку нам важна область энергий, где электроны туннельным образом проходят через барьер: $\omega < p^2/2m + V$, то в подбарьерной области величина $q > 0$ — действительна.

Полное соответствие с методом туннельного гамильтониана достигается, если считать, что для туннельной задачи $\exp(2qa) \gg 1$. (То есть на состояния в каждом берегу слабо влияют процессы "двойного" туннелирования — туда и обратно.) Тогда G^R (298) имеет вид:

$$\begin{aligned} G^R(z, z', p, \omega) &= \\ &= 2m \frac{-2q \exp(-qa)}{(q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0)} \exp[-i\kappa_0 z + i\kappa_1(z' - a)] = \\ &= \frac{-(4q/m) \exp(-qa) i\kappa_1 i\kappa_0}{(q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0)} \times \\ &\times m \frac{\exp[i\kappa_1(z' - a)]}{i\kappa_1} m \frac{\exp(-i\kappa_0 z)}{2i\kappa_0} = \\ &= T(p, \omega) G_0^R(z, 0, p, \omega) G_1^R(a, z', p, \omega), \end{aligned} \quad (301)$$

где функции G_1^R , G_0^R — исходные функции Грина (288) для областей справа и слева от барьера соответственно, а появившийся туннельный матричный элемент равен:

$$T(p, \omega) \equiv \frac{-(4q/m) \exp(-qa) i\kappa_1 i\kappa_0}{(q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0)}. \quad (302)$$

Здесь в качестве функций Грина левого и правого берега были взяты функции бесконечной системы. Однако более логично взять в качестве невозмущённых функций Грина решения для полубесконечной системы, ограниченной потенциальной стенкой той же высоты, что и высота барьера, т.е. функции Грина "отдельно" для левой и правой частей контакта. Эти функции имеют вид:

$$G_0^R(z, 0, p, \omega) = \frac{\exp(-i\kappa_0 z)}{i\kappa_0 - q} 2m, \quad z < 0, \quad (303)$$

$$G_1^R(a, z', p, \omega) = \frac{\exp[+i\kappa_1(z' - a)]}{i\kappa_1 - q} 2m, \quad z' > a.$$

Тогда функция G^R всей системы (301) для $z' > a$ и $z < 0$ может быть записана и таким образом:

$$\begin{aligned} G^R(z, z', p, \omega) &= \\ &= \frac{\exp(-i\kappa_0 z)}{i\kappa_0 - q} 2m \frac{-2q \exp(-qa)}{2m} \frac{\exp[i\kappa_1(z' - a)]}{i\kappa_1 - q} 2m = \\ &= G_0^R(z, 0, p, \omega) T(p, \omega) G_1^R(a, z', p, \omega). \end{aligned} \quad (304)$$

Это полный аналог выражения, характерного для метода туннельного гамильтониана: $G_{12}^R = G_1^R T_{12} G_2^R$, а туннельный матричный элемент приобретает очень простой вид:

$$T(p, \omega) \equiv \frac{-q \exp(-qa)}{m}. \quad (305)$$

Функцию $G^<(z, z')$, необходимую для вычисления тока, проще всего находить по формулам типа (296), после того как найдены решения для $G^{R(A)}(z, z')$ в разных областях по z . Поскольку в формулу, аналогичную (296), теперь будут входить $\Sigma^<$ и левой, и правой от барьера областей, то в функции $G^<(z, z')$ будут содержаться и числа заполнения $n_0(\omega)$, и числа $n_1(\omega)$, т.е. будет содержаться информация о приложенной к контакту разности потенциалов.

Ток через барьер определяется обычной формулой:

$$j = -\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z'} \right) G^<(z, z') \Big|_{z=z'}. \quad (306)$$

В тех областях структуры, где полный ток сохраняется (где нет ухода электронов во внешний термостат), можно для вычислений по этой формуле выбирать любую плоскость z . Удобно брать плоскость $z = 0$ или $z = a$. Результат точного вычисления функции $G^<(z, z')$ приводит к следующему значению тока (в том же приближении $\exp(2qa) \gg 1$):

$$j(p, \omega) = \frac{-4q^2 \exp(-2qa) (\kappa_1 + \kappa_1^*)(\kappa_0 + \kappa_0^*)}{|q - i\kappa_1|^2 |q - i\kappa_0|^2} (n_0(\omega) - n_1(\omega)). \quad (307)$$

Это плотность тока для частиц с импульсом p вдоль слоёв и энергией ω . Полный ток $J = \int dp d\omega j(p, \omega)$. Оказывается, что это выражение можно переписать через тот же туннельный матричный элемент $T(p, \omega)$, который был введён в формулах (304), (305), в форме, полностью эквивалентной методу туннельного гамильтониана:

$$\begin{aligned} j(p, \omega) &= T(p, \omega) [\text{Im } G_1^R(a, a, p, \omega) T^*(p, \omega) G_0^<(0, 0, p, \omega) - \\ &- G_1^<(a, a, p, \omega) T^*(p, \omega) \text{Im } G_0^R(0, 0, p, \omega)]. \end{aligned} \quad (308)$$

Так как для функций Грина отдельно левого берега имеем выражения (см. (290))

$$G_0^<(0, 0, p, \omega) = i n_0(\omega) \frac{\kappa_0 + \kappa_0^*}{|q - i\kappa_0|^2}, \quad (309)$$

$$\text{Im } G_0^R(0, 0, p, \omega) = \frac{\kappa_0 + \kappa_0^*}{|q - i\kappa_0|^2}$$

и аналогичные выражения для правого.

Таким образом, мы видим следующее соответствие.

В методе туннельного гамильтониана исходно есть две функции Грина G_k и G_p , описывающие электроны в

левым и правым берегом контакта (или в квантовой яме) и туннельный гамильтониан вида

$$H_{\text{tun}} = \sum_{k,p} T_{k,p} c_k^+ c_p + \text{h.c.}, \quad (310)$$

описывающий переходы из состояний k слева от барьера в состояния p справа от барьера (и наоборот). Здесь эта схема выглядит так: исходные "нулевые" функции Грина — это тоже функции Грина отдельно для области слева и справа от барьера, а туннельный матричный элемент зависит от частоты и продольного импульса и символически может быть записан как $\delta(z_1)T(p, \omega)\delta(z_2 - a)$. Это означает, что пространственные аргументы функций Грина, связанных туннельным матричным элементом, должны быть взяты на краю барьера (каждая на своём). Если для туннельного гамильтониана недиагональная функция G_{kp} имеет вид

$$G_{kp} = G_k T_{k,p} G_p, \quad (311)$$

то теперь такой недиагональной функции Грина соответствует функция $G(z, z')$ с аргументами z и z' , взятыми по разные стороны барьера, например, $z < 0$, $z' > a$. Тогда:

$$G_{kp} \rightarrow G(z, z'), \quad z < 0, \quad z' > a, \quad (312)$$

$$G_k T_{k,p} G_p \rightarrow G_0(z, 0, p, \omega) T(p, \omega) G_1(a, z', p, \omega). \quad (313)$$

Ток через контакт в подходе туннельного гамильтониана даётся формулой:

$$J = \sum_{k,p} (T_{kp} G_{kp}^< - T_{kp}^* G_{pk}^<) \rightarrow \\ \rightarrow (T(p, \omega) G^<(0, a, p, \omega) - T^*(p, \omega) G^<(a, 0, p, \omega)). \quad (314)$$

Получается, что в случае слабого туннелирования все физические величины выражаются через эффективный туннельный элемент $T(p, \omega)$ и функции Грина изолированных правого и левого берега, взятые для аргументов z на краю барьера.

9.5. Термоэмиссия

В качестве примера конкретного вычисления в таком континуальном подходе покажем, основываясь на работе [67], как можно решить задачу о величине тока термоэмиссии из металла, пользуясь НДТ. Это задача о потоке электронов в структуре, показанной на рис. 33. Для того чтобы формализовать условие, что все элект-

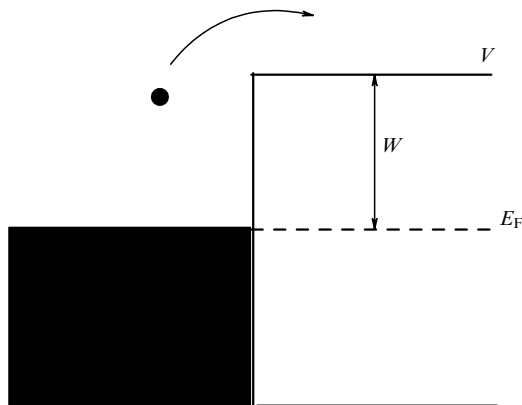


Рис. 33. Термоэмиссия из металла с работой выхода W .

роны, попадающие из металла в область вакуума (направо), быстро уходят на бесконечность и справа поддерживается нулевая плотность частиц, можно применять общий подход предыдущего раздела и считать, что справа химический потенциал имеет большую отрицательную величину.

Необходимая для вычисления тока точная функция $G^R(z, z', p, \omega)$ для $z > 0$, $z' < 0$ имеет вид

$$G^R(z, z', p, \omega) = \frac{2m}{i(\kappa_1 + \kappa_0)} \exp(-i\kappa_0 z' + i\kappa_1 z), \quad (315)$$

где

$$\kappa_0 = \sqrt{2m(\omega + i\gamma) - p^2}, \quad \kappa_1 = \sqrt{2m(\omega - V + i\delta) - p^2}. \quad (316)$$

Пользуясь теми же формулами (292), обеспечивающими поддержание равновесной заселённости электронов в металле:

$$\Sigma^R(z, z', \omega) = -i\gamma\delta(z - z'), \quad (317)$$

$$\Sigma^<(z, z', \omega) = 2i\gamma n(\omega)\delta(z - z'), \quad (318)$$

по общей формуле (296) получим:

$$G^<(z, z', p, \omega) = \\ = \int_{-\infty}^0 dz_1 G^R(z, z_1, p, \omega) 2i\gamma n_0(\omega) G^A(z_1, z', p, \omega). \quad (319)$$

Поскольку в вакууме справа поддерживается всё время нулевая концентрация электронов, то в этой формуле, в отличие от туннельной задачи, отсутствует интеграл по области $z > 0$, там $n(\omega) = 0$. По формуле (306) из функции $G^<$ находится поток электронов из металла в вакуум

$$J = \int \frac{d\omega dp}{(2\pi)^3} \frac{(\kappa_1 + \kappa_1^*)(\kappa_0 + \kappa_0^*)}{|\kappa_0 + \kappa_1|^2} n_0(\omega), \quad (320)$$

в этой формуле автоматически участвуют только распространяющиеся состояния из-за множителей $(\kappa_1 + \kappa_1^*)$, которые не обращаются в нуль только при $\omega > V + p^2/2m$.

Отсюда следуют характерные зависимости тока термоэмиссии от величины работы выхода $W = V - E_F$ и температуры при $T \ll W$:

$$J \propto \exp\left(-\frac{W}{T}\right) T^2 \sqrt{\frac{T}{W}}. \quad (321)$$

9.6. Теплопроводность и термоэффекты

Теми же методами, которыми рассчитывается ток, т.е. поток частиц, может быть рассчитан и поток энергии, переносимой от одного термостата к другому. В тех случаях, когда можно применять квазиклассическое кинетическое уравнение, использование НДТ не даёт какого-то ощутимого преимущества. Однако в задачах переноса тепла в квантовых контактах, при наличии в системе существенно неравновесных распределений, НДТ является наиболее подходящим методом. В туннельных системах энергия, уносимая частицами, скажем, из левого термостата (берега контакта) может быть определена из соотношения, аналогичного соотноше-

нию (239) для потока частиц:

$$Q = \frac{\partial}{\partial t} \langle H_L \rangle = -i \langle [H_L, H_T] \rangle = iT_L \sum_k \varepsilon_k \langle (c_k^+ d - d^+ c_k) \rangle. \quad (322)$$

Через функции Грина поток энергии в стационарном случае выражается также аналогично (243):

$$I = \sum_k T_{kd} \varepsilon_k \int \frac{d\omega}{2\pi} (G_{kd}^<(\omega) - G_{dk}^<(\omega)). \quad (323)$$

В простом случае промежуточной системы без взаимодействия перенос тепла между двумя резервуарами будет даваться формулой:

$$Q = \int 4\gamma_L \gamma_R \omega G_d^A(\omega) G_d^R(\omega) [n_L^0(\omega) - n_R^0(\omega)] \frac{d\omega}{2\pi} = \int \omega j(\omega) \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (324)$$

Собственно, выражение для потока тепла в виде $\int \omega j(\omega) d\omega$ достаточно очевидно: если из термостата уходит поток частиц $j(\omega)$ с энергией ω , то энергия, теряемая термостатом, будет $\omega j(\omega)$.

НДТ позволяет определять и поток частиц, и поток тепла в системе, помещённой между двумя термостатами с разными химическими потенциалами и температурой. Поэтому открывается возможность исследовать этим методом самые разные термоэлектрические эффекты по достаточно общей схеме [68–70]. При наличии неупругих эффектов, например, рассмотренного уже возбуждения колебаний при протекании тока, вычисления потоков тепла могут стать сложнее, однако методы НДТ позволяют решать и такие задачи [71]. Может быть построено и описание термоэффектов в нестационарном случае, есть примеры, когда было предсказано увеличение термоэдс в туннельной системе в нестационарном случае [72].

Невозможно перечислить здесь все эффекты, возникающие в контактах различного типа. Например, флуктуации тока в контактах могут приводить к электромагнитному излучению. Для случая СТМ контакта с металлом такое излучение было рассмотрено методами НДТ в работе [73].

В одномерных структурах из-за взаимодействия электронов возникает так называемая латтинджерова жидкость. В этом состоянии в равновесии хорошо определены коллективные моды (типа плазмонов), но нет определённых одночастичных возбуждений. Если такая одномерная система возбуждается внешним полем или включена в контакт, то описание неравновесного состояния в ней является нетривиальной задачей. Описание неравновесной латтинджеровской жидкости и вопросы о протекании туннельного тока через одномерные каналы с таким электронным состоянием рассматривались в ряде работ на основе методов НДТ [74–79].

10. Взаимодействие сильного электромагнитного поля с электронами в полупроводниках

Если падающее на систему электромагнитное поле возмущает её не сильно, то в этих случаях достаточно применять теорию линейного отклика. Обычные формулы для поглощения света в полупроводниках полу-

чены именно так. Однако при воздействии сильного поля или при развитии лазерной генерации электронная система оказывается возбуждённой настолько сильно, что неравновесность системы уже нельзя не учитывать. Падающая электромагнитная волна, поглощаясь, рождает электрон-дырочные пары. При большой плотности электронов и дырок начинают меняться исходные условия поглощения падающей волны, кроме этого, электроны и дырки рассеиваются на примесях, взаимодействуют друг с другом и с фононами, рекомбинируют с излучением света. Образуется довольно сложная система, поведение которой зависит от интенсивности поля, соотношения между различными скоростями релаксации в электрон-дырочной системе и пр. В такой системе спектр возбуждений начинает определяться неравновесными функциями распределения электронов и дырок, поэтому применение НДТ для таких задач выглядит вполне естественным [80–82].

Основной гамильтониан, с которого начинается рассмотрение таких задач, выглядит просто:

$$\hat{H} = \sum_k [\varepsilon_k^c a_k^+ a_k + \varepsilon_k^v b_k^+ b_k] + \sum_{k,k'} [\lambda_{k,k'} a_k^+ b_{k'} \exp(-i\omega_0 t) + \text{h.c.}], \quad (325)$$

где a, b — операторы уничтожения электрона в зоне проводимости и в валентной зоне, $\varepsilon_k^c, \varepsilon_k^v$ — спектры зоны проводимости и валентной зоны соответственно, а взаимодействие с электромагнитной волной частоты ω_0 описывается последним членом: $\lambda_{k,k'} = E_{k-k'} d_{cv}$, E — амплитуда поля, d_{cv} — дипольный матричный элемент для перехода из валентной зоны в зону проводимости.

Из-за того что часть со взаимодействием явно зависит от времени, в диаграммных рядах функции Грина электронов проводимости $G_{cc}(\omega)$ будут связаны с функциями Грина валентной зоны на сдвинутой частоте $G_{vv}(\omega - \omega_0)$. Часто делают преобразование с помощью оператора $U = \exp[-i\omega_0 t/2 \sum (a_k^+ a_k + b_k^+ b_k)]$ "во вращающуюся систему отсчёта", чтобы убрать из гамильтониана явную зависимость от времени. Тогда взаимодействие приводит к системе уравнений, связывающих четыре функции Грина $G_{cc}(\omega), G_{cv}(\omega), G_{vc}(\omega), G_{vv}(\omega)$. Спектр системы может быть определён из любой пары уравнений для $G_{cc}^R(\omega), G_{vc}^R(\omega)$ или $G_{cv}^R(\omega), G_{vv}^R(\omega)$.

Спектр квазичастиц для преобразованного гамильтониана имеет щель, если частота света больше ширины запрещённой зоны E_g :

$$\omega(k) = \frac{1}{2} \left[\varepsilon_k^c + \varepsilon_k^v \pm \sqrt{(E_g - \omega_0 + \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v)^2 + 4\lambda^2} \right]. \quad (326)$$

Здесь $\varepsilon_k^c = k^2/2m_c$, $\varepsilon_k^v = -k^2/2m_v$, E_g — ширина запрещённой зоны. Для спектра электронов в исходной формулировке это означает появление спектра со щелью в той точке, где состояния валентной зоны и зоны проводимости связываются за счёт внешнего поля резонансным образом: $E_g + \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v = \omega_0$,

$$E_c(k) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\varepsilon_k^c + \varepsilon_k^v + \omega_0 + \sqrt{(E_g - \omega_0 + \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v)^2 + 4\lambda^2} \right], & \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v > \omega_0 - E_g, \\ \frac{1}{2} \left[\varepsilon_k^c + \varepsilon_k^v + \omega_0 - \sqrt{(E_g - \omega_0 + \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v)^2 + 4\lambda^2} \right], & \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v < \omega_0 - E_g. \end{cases} \quad (327)$$

Зная функции G^R , G^A , определяющие спектр системы, легко найти неравновесные функции распределения электронов и дырок, определив функции $G_{cc}^< = i\langle a^+a \rangle$ и $G_{vv}^< = i\langle b^+b \rangle$ из обычных уравнений НДТ, вида:

$$\begin{aligned} G_{cc}^<(\omega) &= G_{cc}^{0<}(\omega) + G_{cc}^{0<}(\omega)\lambda G_{vc}^A(\omega) + G_{cc}^{0R}(\omega)\lambda G_{vc}^<(\omega), \\ G_{vc}^<(\omega) &= G_{vv}^{0<}(\omega)\lambda G_{cc}^A(\omega) + G_{vv}^{0R}(\omega)\lambda G_{cc}^<(\omega). \end{aligned} \quad (328)$$

Даже при нулевой температуре из-за возбуждения светом появляется ненулевая концентрация электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне, причём функции распределения далеки от температурных,

$$n_c(k) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{|E_g - \omega_0 + \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v|}{\sqrt{(E_g - \omega_0 + \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v)^2 + 4\lambda^2}} \right]. \quad (329)$$

Эта функция распределения имеет острый пик при резонансных значениях энергии электрона, там, где частота света равна энергии перехода из валентной зоны в зону проводимости $E_g + \varepsilon_k^c - \varepsilon_k^v = \omega_0$. Но появление сильно неравновесного распределения электронов и дырок приводит к уменьшению поглощения волны с частотой ω_0 . А в случае лазерной генерации, когда создана инверсная заселённость носителей, излучение света "вызывает дырку" в распределении электронов на резонансной частоте. То есть электромагнитная волна и электроны образуют довольно сложную связанную систему, в которой из-за взаимодействия возникают неравновесные распределения, от чего меняется и интенсивность взаимодействия волны и электронов. Большую роль в этих задачах играет недиагональная функция Грина $G_{cv}^<(t, t) = i\langle a^+(t)b(t) \rangle$, которая определяет величину поляризации в системе. Полная система уравнений, описывающая прохождение мощного импульса через среду или появление лазерной генерации, должна включать в себя ещё и уравнения для электромагнитного поля, в которых в качестве источника стоит поляризация (токи), возникающие в системе. Такая полная система уравнений, выписанная в работе [83] с учётом рассеяния электронов на примесях, взаимодействия с фононами и кулоновского взаимодействия, является очень громоздкой. Во многих случаях для конкретных расчётов приходится использовать те или иные приближения. Для более подробного знакомства с данной областью можно посмотреть книги [7, 84]. Выше был рассмотрен простейший пример стационарного неравновесного состояния, но, помимо стационарного облучения светом полупроводника, очень актуальным является вопрос о прохождении коротких и ультракоротких сильных световых импульсов через вещество. В этом случае функции Грина существенно зависят от двух времён и задача становится более сложной. В работах [85, 86] была исследована с помощью НДТ динамика электрон-дырочных корреляций, динамика формирования экранирования, формирования плазменных мод в полупроводнике после короткого сильного лазерного импульса.

Особенно актуальным вопрос о неравновесном и нестационарном состоянии становится в системах типа каскадного лазера (полупроводниковые сверхрешётки), где, кроме обычных процессов рассеяния на примесях и фононах, появляется ещё дополнительная динамика — туннелирование электронов из одной квантовой ямы в

другую. Пользуясь НДТ, можно показать, как различные приближённые подходы связаны друг с другом и где границы применимости упрощённых подходов [87]. В работе [88] было проведено сравнение решения квазиклассического уравнения Больцмана с более точными уравнениями НДТ для режима нелинейного транспорта в сверхрешётках при учёте неупругих процессов рассеяния. Изучение коэффициента усиления, ширины линии излучения в каскадных лазерах было продолжено, например, в работах [89, 90]. Причём в статье [90] вычисления в рамках НДТ показали, что уширение линии излучения каскадного лазера, связанное с рассеянием на примесях, может быть меньше, чем это оценивалось из простых теорий.

Наконец, НДТ может применяться для изучения неравновесных бозе-конденсатов. Сейчас широко исследуются такие экситонные, фотонные бозе-конденсаты, появляющиеся в полупроводниковых структурах, микрорезонаторах при воздействии сильного электромагнитного поля (см., например, [91]).

11. Метод вспомогательных частиц в неравновесной диаграммной технике

Метод вспомогательных частиц (псевдочастиц, slave-particles) был сформулирован, видимо, впервые в работе А.А. Абрикосова [92] для описания кондо-примеси. В этой работе был изложен принцип метода в рамках температурной диаграммной техники. Позже в ряде работ [93–95] были предприняты попытки установить общие правила диаграммной техники для метода вспомогательных частиц. Однако получающаяся техника сильно отличалась от обычной и, чтобы обойти трудности, использовалось приближение среднего поля, в каком-то смысле "убивающее" всю суть данного подхода. Обобщение метода псевдочастиц на НДТ было сделано в работах [96–98]. Но в этих работах авторы ограничились только диаграммами низших порядков и не были сформулированы общие правила построения диаграммных рядов в НДТ.

В этом разделе будет объяснено, как работает метод псевдочастиц на примере модели Хаббарда (Андерсона), и показано, как правильно должна строиться НДТ в этом случае [99].

Исходно гамильтониан Хаббарда формулируется для описания зонного движения электронов в подходе сильной связи с учётом сильного кулоновского взаимодействия двух электронов, когда они находятся на одном узле (атоме):

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} U n_{i\sigma} n_{i-\sigma} + \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}, \quad (330)$$

где $c_{i\sigma}^+$ — оператор рождения электрона со спином σ на узле решетки "i", ε_i — энергия электронного уровня, μ — химический потенциал, t_{ij} — матричные элементы перескока между узлами и U — кулоновское отталкивание электронов на одном узле.

Метод вспомогательных частиц, или псевдочастиц, заключается в том, что каждое из четырёх возможных состояний на одном узле — нет электронов, один электрон того или другого спина, два электрона противоположных спинов — описывается как независимая псевдочастица. Операторы рождения таких псевдочастиц соот-

ветствуют появлению на узле определённых физических состояний:

$$b^+ \Rightarrow |0\rangle, \quad f_\sigma^+ \Rightarrow c_\sigma^+ |0\rangle, \quad d^+ \Rightarrow c_\uparrow^+ c_\downarrow^+ |0\rangle, \quad (331)$$

по своему физическому смыслу b и d являются бозе-операторами, а f — ферми-операторами. Заметим, что вакуумное состояние для псевдочастиц является совершенно нефизическим и не должно фигурировать ни в каких выражениях, так как физическим состояниям отвечают только те псевдочастичные состояния, в которых есть ровно одна псевдочастица b, f_σ, d на каждом узле. Таким образом, в псевдочастичном представлении необходимо ограничиться только физическими состояниями, удовлетворяющими соотношению:

$$\hat{N}_i = \sum_\sigma f_\sigma^+ f_\sigma + b^+ b + d^+ d = 1. \quad (332)$$

Исходный "физический" оператор рождения электрона выражается через псевдочастичные следующим образом:

$$c_\sigma^+ = f_\sigma^+ b + d^+ f_{-\sigma}. \quad (333)$$

В псевдочастичном представлении одноузельная часть гамильтониана с кулоновским взаимодействием между электронами превращается в гамильтониан не-взаимодействующих частиц:

$$\hat{H}^0 = \sum_i \left(\sum_\sigma \varepsilon f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + (2\varepsilon + U) d_i^+ d_i + 0 b_i^+ b_i \right). \quad (334)$$

Зато переходы между узлами выглядят теперь как некоторое взаимодействие между псевдочастицами

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} (f_{i\sigma}^+ b_i + d_i^+ f_{i-\sigma}) (f_{j\sigma} b_j^+ + d_j f_{j-\sigma}^+). \quad (335)$$

Уже отсюда ясно, что метод псевдочастиц имеет смысл применять при сильном кулоновском взаимодействии, точнее, при малом отношении $t_{ij}/U \ll 1$. В противном случае более естественно использовать исходную формулировку в обычных электронных операторах.

Как уже говорилось, любое физическое состояние должно содержать ровно одну псевдочастицу на каждом узле. Только в этом подпространстве, определяемом ограничением (332), отображение исходной задачи на язык псевдочастиц будет точным. Проекция на это подпространство может быть сделана разными способами, мы будем следовать приёму, предложенному А.А. Абрикосовым [92]. Этот приём заключается в следующем. Добавим большую положительную константу λ_i к энергии каждого псевдочастичного состояния на узле " i ":

$$\hat{H}_\lambda^0 = \sum_i \left[\sum_\sigma (\varepsilon + \lambda_i) f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \lambda_i b_i^+ b_i + (2\varepsilon + U + \lambda_i) d_i^+ d_i \right]. \quad (336)$$

Мы будем рассматривать усреднение по термодинамически равновесному состоянию в качестве начальных условий в НДТ. Тогда среднее по состояниям с n псевдочастицами на узле " i " будет иметь больцмановский вес $\langle n | \dots | n \rangle \propto \exp(-n\lambda_i/T)$ для больших λ_i (T — температура). Поэтому можно оставить усреднение только по состояниям с одной псевдочастицей на каждом узле с

помощью следующей операции:

$$\lim_{\lambda_i \rightarrow \infty} \left\{ \exp \left(\frac{\lambda_i}{T} \right) \times \langle \dots \rangle \right\}. \quad (337)$$

Состояния с двумя и более псевдочастицами имеют экспоненциально малый вес и исчезают в пределе $\lambda_i \rightarrow \infty$. Нефизическое "вакуумное состояние" без псевдочастиц также даёт нулевой вклад, так как и гамильтониан, и любой физический оператор представляется в нормально упорядоченном виде, в котором первым всегда действует псевдочастичный оператор уничтожения.

Обеспечив условие $N_i = 1$ для начального состояния, мы, тем самым, будем работать только с такими состояниями, так как каждый член в гамильтониане сохраняет число псевдочастиц на каждом узле, соответственно и оператор эволюции также будет сохранять условие $N_i = 1$.

После такого предельного перехода псевдочастичные числа заполнения определяются следующими выражениями ($n_\lambda, b_\lambda, d_\lambda$ — равновесные числа заполнения для гамильтониана (336)):

$$\begin{aligned} n_0 &= (Z_0)^{-1} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \left[\exp \left(\frac{\lambda}{T} \right) n_\lambda \right] = \\ &= \frac{\exp(-\varepsilon/T)}{1 + 2 \exp(-\varepsilon/T) + \exp[-(2\varepsilon + U)/T]}, \\ b_0 &= (Z_0)^{-1} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \left[\exp \left(\frac{\lambda}{T} \right) b_\lambda \right] = \\ &= \frac{1}{1 + 2 \exp(-\varepsilon/T) + \exp[-(2\varepsilon + U)/T]}, \\ d_0 &= (Z_0)^{-1} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \left[\exp \left(\frac{\lambda}{T} \right) d_\lambda \right] = \\ &= \frac{\exp[-(2\varepsilon + U)/T]}{1 + 2 \exp(-\varepsilon/T) + \exp[-(2\varepsilon + U)/T]}, \end{aligned} \quad (338)$$

где

$$\begin{aligned} Z_0 &= \text{Sp}_{N=1} [\exp(-\beta \hat{H})] = \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \left\{ \exp(\beta \lambda) \text{Sp} [\exp(-\beta \hat{H}_\lambda) \hat{N}] \right\}. \end{aligned} \quad (339)$$

Эти числа заполнения естественно удовлетворяют необходимому ограничению на число псевдочастиц:

$$b_0 + 2n_0 + d_0 = 1. \quad (340)$$

Интересующие нас характеристики электронной системы: спектр, плотность состояний, числа заполнения и т.д. — могут быть извлечены из обычных электронных функций Грина НДТ:

$$G_{\sigma ij}^{\alpha, \beta}(t, t') = -i \langle T_{CC} c_{i\sigma}(t), c_{j\sigma}^+(t') \rangle. \quad (341)$$

В представлении псевдочастиц электронные функции Грина выглядят как двухчастичные функции:

$$\begin{aligned} G_{\sigma ij}^{--}(t, t') &= \\ &= -i \langle T b_i^+ f_{i\sigma}(t), f_{j\sigma}^+ b_j(t') \rangle - i \langle T f_{-i\sigma}^+ d_i(t), d_j^+ f_{-j\sigma}(t') \rangle - \\ &- i \langle T f_{-i\sigma}^+ d_i(t), f_{j\sigma}^+ b_j(t') \rangle - i \langle T b_i^+ f_{i\sigma}(t), d_j^+ f_{-j\sigma}(t') \rangle. \end{aligned} \quad (342)$$

Так, запаздывающая функция Грина изолированного хаббардовского узла является суммой двух простых петель в псевдочастичном представлении (рис. 34).

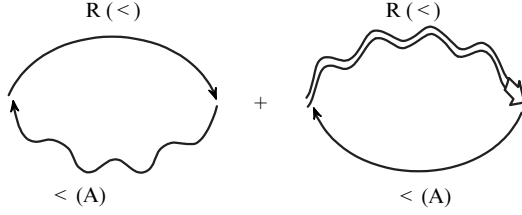


Рис. 34. Запаздывающая одноузловая функция Грина электронов. Сплошной линией показана псевдофермионная функция, волнистой — "вакуумная" псевдобозонная функция, двойной волнистой — псевдобозонная функция двойного заполнения.

После проектирования на физическое подпространство эта функция Грина электронов равна:

$$G_{ii\sigma 0}^R(t-t') = i \int \frac{d\omega_1}{2\pi} [B_0^<(t'-t)N_{\sigma 0}^R(t-t') + B_0^A(t'-t)N_{\sigma 0}^<(t-t') - N_{-\sigma 0}^<(t'-t)D_0^R(t-t') - N_{-\sigma}^A(t'-t)D^<(t-t')]. \quad (343)$$

Здесь появились псевдочастичные функции Грина B , N , D :

$$\begin{aligned} N_{0\sigma}^<(t-t') &= in_0 \exp[-i\varepsilon(t-t')], \\ B_0^<(t-t') &= -ib_0, \\ D_0^<(t-t') &= -id_0 \exp[-i(2\varepsilon + U)(t-t')], \end{aligned} \quad (344)$$

а n_0 , b_0 , d_0 даются формулой (338). Запаздывающие псевдочастичные функции имеют вид:

$$\begin{aligned} N_{0\sigma}^R(t-t') &= -i\theta(t-t') \exp[-i\varepsilon(t-t')], \\ B_0^R(t-t') &= -i\theta(t-t'), \\ D_0^R(t-t') &= -i\theta(t-t') \exp[-i(2\varepsilon + U)(t-t')]. \end{aligned} \quad (345)$$

Сделав преобразование Фурье по времени, получаем обычные электронные функции Грина для одноузловой модели Хаббарда:

$$G_{0\sigma}^R(\omega) = \frac{n_0 + b_0}{\omega - \varepsilon + i\delta} + \frac{n_0 + d_0}{\omega - \varepsilon - U + i\delta}. \quad (346)$$

Псевдочастичные функции (344), (345) являются теми элементами, из которых строится неравновесная диаграммная техника в псевдочастичном представлении. Однако правила, по которым в диаграммы входят эти функции, и возможные типы диаграмм отличаются от обычных. Для того чтобы понять, к каким особенностям диаграммной техники приводит ограничение на число частиц (332), необходимо проследить, что происходит при предельном переходе $\lambda \rightarrow \infty$ (337). Пока параметр λ остаётся конечным, выполняются все обычные правила НДТ, как если бы псевдочастицы были обычными бозонами и фермионами. При этом в диаграммах появляются различные псевдочастичные функции $G^<$

$$\begin{aligned} G_{fa}^<(t-t') &= in_\lambda \exp[-i(\varepsilon + \lambda)(t-t')], \\ G_b^<(t-t') &= -ib_\lambda \exp[-i\lambda(t-t')], \\ G_d^<(t-t') &= -id_\lambda \exp[-i(2\varepsilon + U + \lambda)(t-t')]. \end{aligned} \quad (347)$$

Существенно, что любое из псевдочастичных чисел заполнения n_λ , b_λ , d_λ при больших λ пропорционально

$\exp(-\lambda/T)$. Соответственно, и любая из псевдочастичных функций Грина $G^<$ (347) содержит этот экспоненциально малый множитель. Поэтому после выполнения предельного перехода (337) останутся только диаграммы, содержащие ровно одну псевдочастичную функцию $G^<$, которые заменятся на выражения (344). Это требование является очень сильным и делает невозможным, например, существование уравнения Дайсона.

Взаимодействие в псевдочастичном представлении всегда выглядит как уничтожение частицы одного сорта и рождение частицы другого сорта. Для модели Хаббарда это взаимодействие (335), для модели Андерсона, в которой только на одном узле решётки учитывается кулоновое отталкивание, взаимодействие имеет вид

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{k\sigma} [t_k(f_\sigma^+ b + d^+ f_{-\sigma}) c_{k\sigma} + \text{h.c.}], \quad (348)$$

где $c_{k\sigma}$ — оператор уничтожения электрона в зоне проводимости. Такой вид гамильтонианов взаимодействия означает, что любая диаграмма представляет собой некоторое число замкнутых петель из псевдочастичных функций Грина, относящихся к данному узлу, соединённых между собой либо переходами t_{ij} в модели Хаббарда, либо функциями Грина зонных электронов в модели Андерсона. Легко понять, что в любой замкнутой псевдочастичной петле обязательно должна присутствовать хотя бы одна функция $G^<$. Если знаки всех вершин в петле одинаковы, т.е. не появляются явным образом пары функций $G^<$ и $G^>$, то можно использовать представление $G^{--} = G^R + G^<$ или $G^{++} = G^< - G^A$. Все функции в замкнутой петле не могут быть равны G^R или G^A , так как выражение вида $G^R(t-t_1)G^R(t_1-t_2)\dots G^R(t_{n-1}-t_n)G^R(t_n-t)$ (и аналогично для G^A) обращается в нуль. Поэтому любая петля либо явно содержит смену знака "—" на "+", либо содержит хотя бы одну функцию $G^<$, как часть функций G^{--} , G^{++} . Поэтому требование, чтобы в любой диаграмме присутствовала только одна функция $G^<$, сразу означает, что останутся только диаграммы ровно с одной псевдочастичной петлёй, относящейся к данному узлу решётки.

Строение этой одной псевдочастичной петли также оказывается жёстко заданным. Для функции $G_{ii}^<$ только в одной вершине на каждой части петли может поменяться знак с "+" на "-", так как в противном случае сразу возникало бы несколько функций $G^<$. Кроме одной функции $G^<$ на верхней петле и одной функции $G^>$ на нижней петле, все остальные функции есть функции G^{--} и G^{++} . В силу соотношений $G^{--} = G^R + G^<$ и $G^{++} = G^< - G^A$ от этих функций остаются только функции G^R или G^A соответственно. Дальнейшие упрощения связаны с тем, что надо просуммировать диаграммы со всеми возможными расположениями пропагатора $G^>$ на нижней петле. Поскольку одно из псевдочастичных чисел заполнения уже появилось в верхней части диаграммы, то от любого пропагатора $G^>$ для псевдочастиц останется только константа $-2i$, и можно записать, что пропагатор $G^> = G^R - G^A$. Учитывая, что вершины на петле связаны либо функциями Грина зонных электронов (в модели Андерсона), либо электронными линиями, уходящими на другие узлы решётки (в модели Хаббарда), можно показать, что при последовательной перестановке по нижней петле пропагатора $G^> = G^R - G^A$

же двумя петлевыми диаграммами, что и на рис. 34, только с перенормированными верхней и нижней псевдо-частичными линиями. Одна из этих линий в силу особенностей метода псевдочастиц содержит только запаздывающие (или только опережающие) псевдо-частичные функции. Такую линию для краткости будем называть запаздывающей или опережающей псевдо-частичной (ПЧ) функцией Грина. Другая линия содержит одно из псевдо-частичных чисел заполнения, эту линию назовём псевдо-частичной функцией "меньше". Надо понимать, что название "псевдо-частичная функция Грина" применяется к объекту, являющемуся суммой некоторых определённых диаграмм, для которых можно сконструировать уравнение Дайсона. Но эти объекты не обладают свойствами настоящих функций Грина физических частиц.

Суммируя все диаграммы со вставками, подобными показанной на рис. 37, для "запаздывающей ПЧ функции Грина" получается привычное уравнение Дайсона:

$$\begin{aligned} N_{\sigma}^R(\omega) &= N_{\sigma}^{0R}(\omega) + N_{\sigma}^{0R}(\omega) \Sigma_{N\sigma}^R(\omega) N_{\sigma}^R(\omega), \\ B_{\sigma}^R(\omega) &= B^{0R}(\omega) + B^{0R}(\omega) \Sigma_B^R(\omega) B^R(\omega), \\ D_{\sigma}^R(\omega) &= D^{0R}(\omega) + D^{0R}(\omega) \Sigma_D^R(\omega) D^R(\omega). \end{aligned} \quad (350)$$

Здесь через N , B , D обозначены функции для псевдо-фермиона (однократно заполненный узел), псевдобозона, соответствующего пустому узлу и псевдобозона, описывающего двукратно заполненный узел, соответственно. Функции Грина нулевого приближения N^0 , B^0 , D^0 даются выражением (344), (345).

Простейшее приближение для собственно энергетических частей Σ^R даёт выражением:

$$\begin{aligned} \Sigma_{N\sigma}^R(\omega) &= i \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} [\mathcal{G}_{\sigma}^{el>}(\omega_1) B^R(\omega - \omega_1) + \\ &\quad + \mathcal{G}_{-\sigma}^{el<}(\omega_1) D^R(\omega + \omega_1)], \\ \Sigma_B^R(\omega) &= i \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \mathcal{G}_{\sigma}^{el<}(\omega_1) N_{\sigma}^R(\omega + \omega_1), \\ \Sigma_D^R(\omega) &= i \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \mathcal{G}_{-\sigma}^{el>}(\omega_1) N_{\sigma}^R(\omega - \omega_1), \end{aligned} \quad (351)$$

где "внешняя электронная линия" $\mathcal{G}_{\sigma}^{<(>)}$ (349) в k, ω представлении равна:

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{<(>)}(\omega) = \sum_k \varepsilon_k^2 G_{el\sigma}^{<(>)}(\omega, k). \quad (352)$$

Входящая в это выражение электронная функция Грина удовлетворяет общим соотношениям:

$$G_{el\sigma}^{<}(\omega, k) = -2i n(\omega) \text{Im} G_{el\sigma}^R(\omega, k), \quad (353)$$

$$G_{el\sigma}^{>}(\omega, k) = -2i(n(\omega) - 1) \text{Im} G_{el\sigma}^R(\omega, k), \quad (354)$$

где $n(\omega)$ — распределение Ферми, а запаздывающая электронная функция Грина $G_{el\sigma}^R$ для модели Андерсона является просто функцией Грина зонных электронов, а для модели Хаббарда должна определяться самосогласованным образом.

Выбор собственно энергетических частей в виде (351) означает, что мы суммируем только "вложенные" ряды диаграмм, показанные на рис. 39. В этом приближении мы учитываем взаимодействие электронов на данном узле (применением метода псевдочастиц), но заменяем слож-

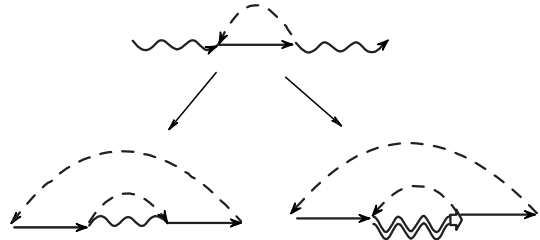


Рис. 39. Пример собственно-энергетических частей, используемых в данном приближении. Штриховые линии — "внешняя электронная линия" (349).

ное коррелированное движение электронов по остальной части решётки на сумму некоррелированных процессов — уход с данного узла, распространение без взаимодействия по окружению и возврат на данный узел. Движение электрона по окружению описывается некоторой усреднённой электронной функцией Грина, которая должна определяться самосогласованно на основе той одно-узельной электронной функции Грина, которая вычисляется в методе псевдочастиц. Эта идеология похожа на теорию динамического среднего поля (DMFT) [101], хотя сам подход и все основные уравнения здесь совсем другие.

Ещё раз заметим, что, хотя уравнение Дайсона для выделенных диаграммных рядов имеет обычный вид, оно не является уравнением для каких-либо реальных частиц. Запаздывающие собственно энергетические части в нём — неполные по сравнению со случаем реальных частиц, они не содержат слагаемых с ПЧ функциями $G^{<}$, т.е. нет частей с ПЧ числами заполнения. При заданной функции $G_{el\sigma}^R$ система уравнений (350), (351) замкнута и позволяет найти самосогласованным образом все ПЧ запаздывающие и опережающие функции.

Используя то же приближение для неприводимых частей, можно написать уравнения Дайсона и для линий, содержащих одно из псевдо-частичных чисел заполнения:

$$\begin{aligned} N_{\sigma}^{<}(\omega) &= N_{\sigma}^R(\omega) [\Sigma_{N\sigma}^{<}(\omega) + (N_0^R)^{-1} N_{\sigma}^{0<}(\omega) (N_0^A)^{-1}] N_{\sigma}^A(\omega), \\ B^{<}(\omega) &= B^R(\omega) [\Sigma_B^{<}(\omega) + (B_0^R)^{-1} B^{0<}(\omega) (B_0^A)^{-1}] B^A(\omega), \\ D^{<}(\omega) &= D^R(\omega) [\Sigma_D^{<}(\omega) + (D_0^R)^{-1} D^{0<}(\omega) (D_0^A)^{-1}] D^A(\omega) \end{aligned} \quad (355)$$

с неприводимыми частями такого вида:

$$\begin{aligned} \Sigma_{N\sigma}^{<}(\omega) &= i \int \frac{d\omega_1}{2\pi} [\mathcal{G}_{\sigma}^{el<}(\omega_1) B^{<}(\omega - \omega_1) + \\ &\quad + \mathcal{G}_{-\sigma}^{el>}(\omega_1) D^{<}(\omega + \omega_1)], \\ \Sigma_B^{<}(\omega) &= i \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \mathcal{G}_{\sigma}^{el>}(\omega_1) N_{\sigma}^{<}(\omega + \omega_1), \\ \Sigma_D^{<}(\omega) &= i \sum_{\sigma} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \mathcal{G}_{-\sigma}^{el<}(\omega_1) N_{\sigma}^{<}(\omega - \omega_1). \end{aligned} \quad (356)$$

Система уравнений (355), (356) также замкнута, поскольку запаздывающие и опережающие ПЧ функции Грина уже определены. Так что все ПЧ функции "меньше" могут быть самосогласованно рассчитаны из этих уравнений.

После того как определены все перенормированные ПЧ функции Грина, можно вычислить одноузельную электронную функцию Грина из тех же диаграмм, что и

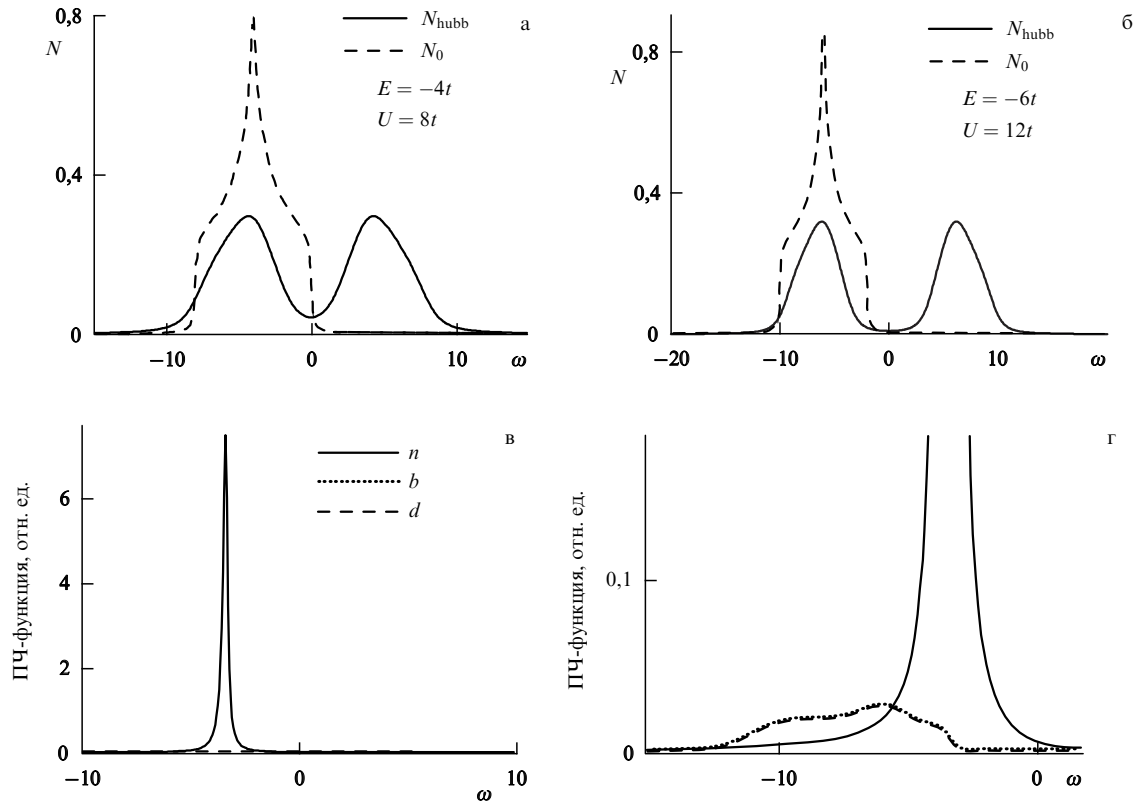


Рис. 40. (а, б) Электронная плотность состояний (сплошная линия) для случая половинного заполнения для двух разных значений кулоновского отталкивания U . Показана также плотность зонных состояний без взаимодействия (штриховая линия), U меряется в единицах перескока t_{ij} . (в, г) ПЧ-функции "меньше" для случая $U = 12t$. Они определяют относительный вес пустых (пунктирная линия), однократно занятых (сплошная линия) и двукратно занятых (штриховая линия) узлов. (г) Часть рис. в с увеличенным масштабом. Видно, что небольшая примесь пустых и двукратно занятых узлов существует и в случае половинного заполнения.

функцию Грина нулевого приближения, но с "полными" псевдочастичными линиями

$$G_{i\sigma}^{\text{R el}}(\omega) = i \int \frac{d\omega_1}{2\pi} [B^<(\omega_1)N_{\sigma}^{\text{R}}(\omega + \omega_1) + B^{\text{A}}(\omega_1)N_{\sigma}^<(\omega + \omega_1) - N_{-\sigma}^<(\omega_1)D^{\text{R}}(\omega + \omega_1) - N_{-\sigma}^{\text{A}}(\omega_1)D^<(\omega + \omega_1)]. \quad (357)$$

В простейшем варианте зонная электронная функция Грина, стоящая во "внешней электронной линии" учётных диаграмм, связана с одноузловой функцией обычным соотношением:

$$G_{\text{el}\sigma}^{\text{R}}(\omega, k) = \frac{1}{(G_{i\sigma}^{\text{R el}})^{-1}(\omega) - \varepsilon_k}. \quad (358)$$

Таким образом, задав электронную функцию Грина, можно найти перенормированные ПЧ-линии, определяющие вид одноузловой электронной функции Грина. А одноузловая функция определяет ту зонную электронную функцию, которая появляется в неприводимых частях для ПЧ-функций. Это даёт полностью самосогласованную схему определения электронной функции Грина.

При подобных самосогласованных вычислениях мы опять встречаемся с некоторыми отличиями от уравнений с обычными функциями Грина реальных частиц. Те объекты, которые были названы ПЧ-функциями Грина, на самом деле являются суммой некоторого подряда

диаграмм, и свойства их совсем не обязаны быть такими же, как у функций Грина настоящих частиц. В частности, спектральный вес для таких ПЧ-функций Грина не нормирован автоматически, в отличие от реальных частиц. Самосогласованная схема позволяет найти форму спектральной функции, но не её абсолютное значение. Поэтому требуется ещё наложить условие нормировки для вычисленной электронной функции Грина

$$-\frac{1}{\pi} \int d\omega \sum_k \text{Im } G_{\text{el}\sigma}^{\text{R}}(\omega, k) = 1.$$

Несмотря на простоту использовавшихся приближений, данный подход даёт совершенно разумный вид электронной плотности состояний и его изменение с ростом кулоновского отталкивания. Что очень существенно, в самосогласованном подходе ПЧ числа заполнения определяются только параметрами модели. Независимо от изменения начальных значений n_0, b_0, d_0 все ПЧ-функции "меньше" сходятся в процессе процедуры самосогласования к одним и тем же значениям. То есть, как и положено в НДТ при непертурбативных вычислениях, память о начальных функциях распределения теряется.

Ниже приведены результаты самосогласованных вычислений для модели Хаббарда на двумерной квадратной решётке. На рисунке 40 показан случай полузаполненной электронной зоны ($\mu = \varepsilon + U/2$). Диэлектрическая щель начинает отчётливо формироваться при значениях кулоновского отталкивания порядка ширины

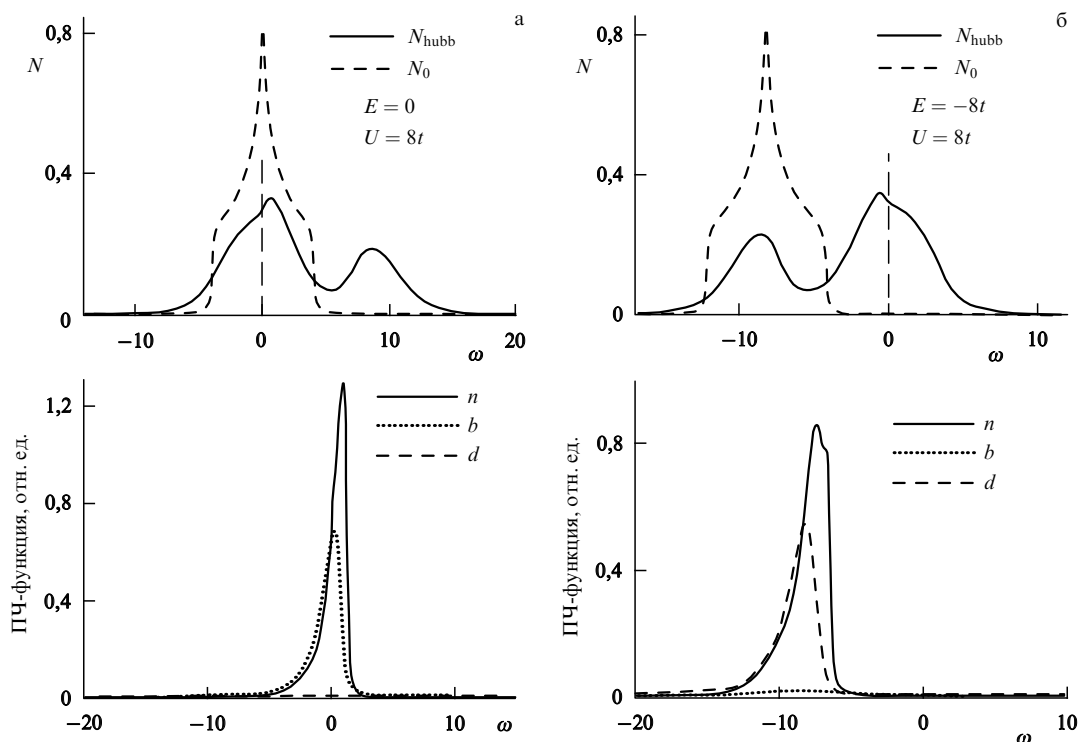


Рис. 41. Электронная плотность состояний (сплошная линия) для промежуточных концентраций (верхний ряд): (а) концентрация меньше и (б) больше, чем $1/2$. Положение химического потенциала соответствует нулю оси абсцисс (вертикальная линия). Нижний ряд — соответствующий данной концентрации относительный вклад состояний с разным числом электронов на узле. Относительный вес пустых узлов — пунктирная линия, однократно занятых — сплошная линия и двукратно занятых — штриховая линия.

зоны проводимости, при дальнейшем увеличении кулоновского отталкивания хаббардовская структура из двух подзон с хорошо определённой щелью между ними становится всё более явной. Заметим, что в данном подходе в плотности состояний нет центрального пика, который появляется как артефакт в теории DMFT [95]. По относительной величине ПЧ-функций "меньше" можно оценить, какое заполнение узлов преобладает. Из рисунка 40 видно, что в случае половинного заполнения на подавляющей части узлов решётки находится один электрон. Доля незаполненных узлов и узлов с двумя электронами пренебрежимо мала.

Если концентрация электронов меньше $1/2$, то нижняя подзона становится больше, начинает меняться и найденное самосогласованным образом соотношение между состояниями с различным заполнением узлов. Растёт вес незаполненных состояний, почти нет двукратно заполненных (рис. 41). Наоборот, при росте концентрации электронов верхняя подзона увеличивается, растёт вес двукратно заполненных состояний, уменьшается количество пустых узлов. Такое поведение носит монотонный характер и совершенно обоснованно физически.

Хотя введенные ПЧ функции "меньше" и не являются функциями Грина настоящих частиц, тем не менее их относительная величина физически осмысленно отражает вес пустых, одно- и двукратно заполненных узлов. Основное преимущество использования НДТ в методе псевдочастиц в том, что это позволяет работать с выражениями в реальном времени. Поэтому вычисления, подобные рассмотренным выше, легко обобщаются на неравновесные и нестационарные эффекты в хаббардовских системах, кондо-системах и т.д.

12. Некоторые другие приложения

12.1. Неупорядоченные системы

НДТ нашла также применение, в некотором смысле неожиданное, в теории неупорядоченных электронных систем. Оказалось, что НДТ может помочь в исследовании равновесных характеристик таких систем, когда, казалось бы, явной необходимости в её применении нет. Проблема, которую позволяет решить НДТ, следующая. В неупорядоченной системе для вычисления каких-либо характеристик требуется проводить усреднение не только по квантовому состоянию, но и по случайному беспорядку. Среднее значение оператора $\hat{A}$ даётся двойным усреднением:

$$\bar{A} = \left\langle \frac{\text{Sp} \{ \exp [-(H+V)/T] \hat{A} \}}{\text{Sp} \{ \exp [-(H+V)/T] \}} \right\rangle_{\text{disorder}}. \quad (359)$$

Случайный потенциал $u(r)$ входит в гамильтониан возмущения $\hat{V}$, обычно предполагается, что беспорядок обладает гауссовой статистикой с некоторой корреляционной функцией:

$$\langle u(r)u(r') \rangle = g(r-r'). \quad (360)$$

Поскольку случайный потенциал примесей входит и в матрицу плотности ρ , то в формуле (359) нельзя усреднять отдельно числитель и знаменатель. На диаграммном языке рассеяние электронов на потенциале примесей описывается обычными диаграммами рис. 2, в которых крестом обозначен случайный потенциал примесей. Если

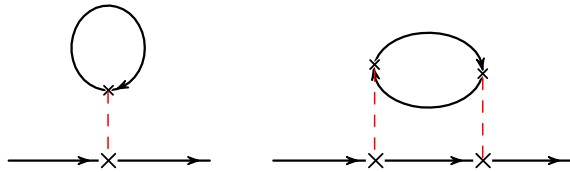


Рис. 42. Исходно не связанные петли после усреднения по беспорядку оказываются соединены корреляционной функцией потенциала (штриховая линия) с остальными частями диаграмм.

случайный потенциал примесей можно считать случайной гауссовой величиной, то при усреднении по беспорядку вершины на диаграммах оказываются соединёнными попарно корреляционной функцией случайного потенциала. В температурной технике сумма всех петель соответствовала знаменателю (359) и сокращалась с несвязанными частями при диаграммном разложении числителя. Однако теперь, после усреднения по беспорядку всего выражения (359), бывшие несвязные части диаграмм оказываются соединёнными с остальными частями диаграмм корреляционной функцией потенциала (рис. 42). Тем самым, бывшие несвязные части не отделяются в виде множителя и диаграммная техника сразу становится сложнее.

Если применять НДТ, то этой проблемы не будет (проблема усреднения знаменателя в термодинамических средних), так как сумма всех несвязных петель в НДТ равна нулю и диаграмм, подобных показанным на рис. 42, не возникает.

Применение НДТ для целей описания локализации было рассмотрено в работе [102]. В этой работе, кроме изложенных диаграммных соображений, была выведена так называемая нелинейная сигма-модель в формулировке НДТ. Подход на основе нелинейной сигма-модели, возникающей в рамках формулировки НДТ в методе функциональных интегралов, является наиболее употребительным сейчас в этой области (называется для краткости обычно "келдышевская нелинейная сигма-модель").

О том, как формулируется НДТ в методе функциональных интегралов, написано много статей (см. [30, 103]), подробно применение НДТ в теории локализации на этом языке было описано в работе [104] и обзоре [105]. Давно исследуемая проблема о взаимном влиянии кулоновского взаимодействия и локализации также была рассмотрена в рамках нелинейной сигма-модели, выведенной в подходе НДТ. В работе [106] были выведены на основе диаграммного анализа ренормгрупповые уравнения, уточнившие первый результат Финкельштейна [107], а в сравнительно недавней работе [108] эти результаты были обобщены на различные типы взаимодействия также в рамках келдышевской нелинейной сигма-модели.

12.2. Физика элементарных частиц и космология

Фейнмановская диаграммная техника появилась в квантовой теории поля и, казалось бы, успешно решала большинство задач в этой области. Однако выяснилось, что не только в физике конденсированного состояния, но и в теории поля, физике элементарных частиц есть разделы, в которых может потребоваться применение НДТ. Это такие области, как процессы рассеяния при высоких температурах, больших плотностях элементар-

ных частиц, процессы множественного рождения в сильном поле. Новые задачи возникают при описании ранней Вселенной, промежуточной стадии столкновения тяжёлых ионов, процессов внутри звёзд, в том числе нейтронных.

Для применения НДТ в физике элементарных частиц было сделано её обобщение на релятивистскую теорию поля. Этому был посвящён ряд работ [34, 103, 109, 110]. В теории поля принята формулировка на языке функциональных интегралов, изложение которого выходит за рамки данного обзора. Кроме названных выше, существует множество работ, в которых хорошо изложено, как формулируется НДТ в методе функционального интегрирования [30, 104, 105]. Единственное отличие от обычного перехода к функциональным интегралам заключается в том, что из-за появления в средних (28) двух типов операторов, времена которых лежат либо на верхней, либо на нижней части контура Келдыша, в функциональных интегралах также появляется двойной набор полей, по которым ведётся интегрирование. С использованием НДТ в релятивистской формулировке недавно, например, были получены новые результаты в такой давно известной области, как рождение пар в сильном поле [111].

Достаточно интересным является применение НДТ в космологии. В работе [112] обсуждается рождение барионов и возможные причины барионной асимметрии на основе квантового кинетического уравнения, полученного методами НДТ. При релятивистском описании нестационарная метрика сама является некоторым возмущением для полей. Обычная теория поля формулировалась в плоском пространстве, как правильно описывать квантовую эволюцию в пространстве с нетривиальной метрикой, вообще говоря, неизвестно. В процессе эволюции, даже начиная с состояния, которое можно было назвать "вакуумом", могут возникать неустойчивости, связанные с рождением каких-либо частиц. Для скалярного поля в пространстве ДеСиттера такая неустойчивость, связанная с интенсивным рождением квантов скалярного поля, обсуждалась в работе [113]. В связи с проблемами квантовой гравитации НДТ также применялась в работе [114].

13. Заключение

В заключение хотелось бы ещё раз остановиться на том, в каких областях может применяться НДТ (диаграммная техника Келдыша) и есть ли у неё преимущества перед другими подходами в решении тех или иных проблем.

1. *Описание релаксационных процессов, квазиклассические кинетические уравнения.*

В этой области есть путь прямого построения цепочки уравнений для корреляторов на основе уравнения Гейзенберга. Такие уравнения тоже учитывают квантовый характер системы, вопрос только в корректном расцеплении высших корреляторов, позволяющем получить замкнутую систему уравнений. Квазиклассические кинетические уравнения могут быть также получены и другими методами, однако НДТ предоставляет простой и ясный путь их получения, кроме того, НДТ даёт возможность последовательно вычислять столкновительный член во всех порядках по взаимодействию.

2. *Функции отклика, временные корреляторы, флуктуации в равновесных системах.*

Для таких задач, в которых надо исследовать свойства равновесных систем или их малое возмущение под действием внешнего поля, успешно применялась и применяется мацубаровская (температурная) диаграммная техника и методы аналитического продолжения Элиашберга. НДТ, конечно, тоже позволяет решать такие задачи (иногда позволяя обойтись более простыми вычислениями), но явного преимущества не даёт. Заметим, что проблему вычисления временных корреляторов для *равновесных* систем часто смешивают с собственно НДТ, называя их одним термином "Real Time Green Functions" (RTGF). Однако если НДТ автоматически даёт и все временные корреляторы в равновесной системе, то методы RTGF, фактически сформулированные в работах [16, 29], совершенно непригодны для вычисления характеристик неравновесной системы.

3. *Неравновесные состояния с потоками частиц, тепла в промежуточной системе между двумя (и больше) резервуарами-термостатами.*

Эта область очень широкая. Сюда попадают туннельные контакты, баллистические контакты, микроконтакты между различными материалами, разнообразные термоэффекты в микро- и наноструктурах и т.д. В этой области НДТ, пожалуй, шире всего и применяется, что объясняется просто: строго говоря, за исключением случаев, когда пригодно обычное квазиклассическое кинетическое уравнение, конкурентов НДТ здесь просто нет. Температурная диаграммная техника в принципе не может быть построена, если в систему включены два (и более) разных термостата. В промежуточной системе возникает сильно неравновесное состояние, не описываемое распределением Гиббса. То, что в простых случаях, когда нет взаимодействия между частицами, эта сильная неравновесность иногда "не чувствуется" и ответ может быть получен в температурной технике, — в известном смысле случайность.

4. *Неравновесные состояния в сильных внешних полях.*

Речь идёт о таком сильном воздействии, когда описание на языке функций отклика теряет смысл, так как система переходит в состояние, очень далёкое от равновесного. Сюда относятся, например, задачи о взаимодействии света большой интенсивности с полупроводниками, описание лазерной генерации в полупроводниковых структурах (в том числе каскадные лазеры). Хотя в некоторых условиях работают более простые приближённые подходы (например, кинетические уравнения баланса), во многих случаях заменить НДТ в этой области нечем.

В эту категорию теперь можно добавить и задачи космологии, и описание ядерных реакций многих частиц.

Таким образом, то, что НДТ имеет широкую область применений, неудивительно — везде, где можно поставить задачу о квантовой эволюции некоторого начального многочастичного состояния, естественно пользоваться НДТ.

И действительно, для многих применение НДТ сейчас стало естественным: в 2015 г. в Web of Science указано около 200 статей, ссылающихся на работу [1], а Google Scholar находит за 2015 г. более 500 работ, использующих технику Келдыша. Однако, — "Карфаген должен быть разрушен", — хотелось бы в самом конце повторить то, с чего начинался обзор. Из-за того что начало активного использования НДТ (не считая единичных ста-

тей в разных областях) было отделено десятилетиями от её создания, возник ряд устойчивых мифов, появление которых связано с тем, что мало кто из использующих НДТ сам читал оригинальные работы 1960-х годов. Эта мифология проявляется в первую очередь в том, что НДТ часто именуется техникой (или методом) Каданова – Бейма – Швингера – Келдыша (Kadanoff – Baym – Schwinger – Keldysh). Безусловно, работы Каданова и Бейма [29], а также Швингера [22] были очень важны, в них, наряду с другими (например, работой Константинова и Переля [18]), проявлялись какие-то из особенностей применения методов теории поля в многочастичных задачах. Эти работы можно назвать предысторией НДТ. Но, если говорить именно о технике, об универсальном аппарате, автоматизировавшем вычисления для неравновесных многочастичных систем, то такой аппарат был впервые сформулирован только в работе [1], поэтому логично отсчитывать историю *неравновесной* диаграммной техники (НДТ) именно с этой работы.

14. Приложение. Теорема Вика для неравновесной диаграммной техники и техника с начальными корреляциями

В теории конденсированного состояния теоремой Вика принято называть утверждение, что среднее от T -упорядоченного произведения нескольких операторов рождения и уничтожения частиц равно сумме всех возможных произведений попарных средних от T -упорядоченных пар этих операторов. Это утверждение на самом деле состоит из двух частей. Собственно теорема, исходно доказанная Виком [27], даёт разложение T -упорядоченного произведения нескольких операторов в сумму произведений этих операторов, но содержащих уже N -упорядочение вместо T -упорядочения. На втором этапе необходимо показать, что при усреднении полученного Виком операторного равенства возникает нужное соотношение между средним от произведения многих операторов и произведением всех возможных попарных средних.

Собственно теорема Вика, т.е. утверждение о способе переупорядочения набора операторов, переносится на случай НДТ почти без изменений. Важнейшим элементом в теореме Вика является понятие "связи" (contraction) двух операторов. Эта величина определяется в обычной теории как разность между T - и N -упорядоченной парой операторов:

$$\overbrace{\hat{a}_1(t_1)\hat{a}_2^+(t_2)} = T(\hat{a}_1(t_1)\hat{a}_2^+(t_2)) - N(\hat{a}_1(t_1)\hat{a}_2^+(t_2)). \quad (361)$$

(Нормальное упорядочение переставляет все операторы рождения левее всех операторов уничтожения, при перестановке двух ферми-операторов знак меняется):

$$N(\hat{a}\hat{a}^+) = \mp \hat{a}^+\hat{a}.$$

Связь двух операторов отлична от нуля только для случая операторов рождения и уничтожения, относящихся к одному состоянию (из-за их некоммутативности). Связь всех других пар операторов равна нулю. Используя явный вид операторов в представлении взаимодействия

$$\hat{a}^+(t_k) = \exp(i\epsilon t_k)\hat{a}^+, \quad \hat{a}(t_k) = \exp(-i\epsilon t_k)\hat{a}, \quad (362)$$

получаем, что связь двух операторов является простой функцией:

$$\widehat{a}_1(t_1)\widehat{a}_2^+(t_2) = \theta(t_1 - t_2) \exp[-i\varepsilon(t_1 - t_2)]. \quad (363)$$

Понятие связи автоматически обобщается на случай НДТ. В этом случае связь двух операторов определяется как разность между их T_C -упорядоченным на контуре Келдыша произведением и нормальным произведением. Легко увидеть, что

$$\begin{aligned} \widehat{a}_1(t_1^x)\widehat{a}_2^+(t_2^\beta) &= T_C(\widehat{a}_1(t_1)\widehat{a}_2^+(t_2)) - N(\widehat{a}_1(t_1)\widehat{a}_2^+(t_2)) = \\ &= \theta_C(t_1^x - t_2^\beta) \exp[-i\varepsilon(t_1 - t_2)], \end{aligned} \quad (364)$$

где θ_C — функция, равная нулю или единице, в зависимости от того, какое из времён "позже" другого с точки зрения их расположения на контуре Келдыша:

$$\theta_C(t_1^x - t_2^\beta) = \begin{cases} \theta(t_1^- - t_2^-), \\ \theta(t_1^- - t_2^+) = 0, \\ \theta(t_1^+ - t_2^-) = 1, \\ \theta(t_2^+ - t_1^+). \end{cases}$$

Рассматривая произведения операторов в представлении взаимодействия, можно явным образом выделить все экспоненты, определяющие зависимость каждого из операторов рождения или уничтожения от времени (362). Как бы мы ни переставляли операторы, всё выражение всегда просто умножается на произведение экспонент от каждого оператора. Поэтому этот общий числовой множитель можно не рассматривать, а интересоваться только перестановками шрёдингеровских операторов, просто помечая их индексом, чтобы помнить об их положении при упорядочении по времени. В самом общем виде, не конкретизируя, какие операторы (рождения или уничтожения) и каких состояний входят в T -произведение многих операторов, теорема Вика в операторной форме выглядит так:

$$\begin{aligned} T(\widehat{a}_1\widehat{a}_2\widehat{a}_3 \dots \widehat{a}_n) &= N(\widehat{a}_1\widehat{a}_2\widehat{a}_3 \dots \widehat{a}_n) + N(\widehat{a_1a_2} \widehat{a}_3 \dots \widehat{a}_n) + \\ &+ N(\widehat{a_1a_2a_3} \widehat{a}_4 \dots \widehat{a}_n) + \dots + N(\widehat{a_1a_2} \widehat{a_3a_4} \widehat{a}_5 \dots \widehat{a}_n) + \dots \\ &+ N(\widehat{a_1a_2} \widehat{a_3a_4} \dots \widehat{a_{n-1}a_n}). \end{aligned} \quad (365)$$

В правой части сначала все операторы упорядочены нормальным образом, затем идёт сумма членов, в которых одна пара операторов заменена их связью (т.е. числовой функцией), а остальные операторы упорядочены нормальным образом. Затем надо две пары операторов заменить их связью и остальные нормально упорядочить и т.д. При замене какого-то числа пар операторов на связи необходимо перебрать все возможные способы выделения этого числа пар из исходного набора операторов. Для фермионов из-за антикоммутативности операторов появляется дополнительное правило: при замене некоторой части операторов на их связь сначала надо переставить эти операторы попарно друг к другу и посчитать количество нужных для этого перестановок. Если число перестановок нечётное, такие члены входят в сумму (365) со знаком минус. (В выражении (365) это не учтено, чтобы не загромождать формулу.) Доказательство формулы (365) несколько не нарушает-

ся, если под T -произведением понимать T_C -упорядочение на контуре Келдыша, а под связью двух операторов — обобщённое выражение (364), поскольку суть теоремы Вика в последовательном переставлении соседних операторов, чтобы от T -упорядочения перейти к нормальному порядку операторов.

Если начальная матрица плотности соответствует системе невзаимодействующих частиц, то ясно, что операторы, относящиеся к разным одночастичным состояниям, усредняются независимо. Поэтому остаётся только проследить, что происходит при усреднении по начальной матрице плотности левой и правой частей операторного равенства (365) в случае, когда все операторы $\widehat{a}$ есть операторы рождения или уничтожения частицы в каком-то одном состоянии. Причём ясно, что ненулевыми будут только такие средние, в которых одинаковое число операторов рождения и уничтожения. Общий принцип того, каким образом среднее от большого числа членов в правой части (365) собирается в произведение T -упорядоченных пар операторов, легко увидеть на примере четырёх операторов. Выписав все члены в правой части (365) и усреднив по начальной матрице плотности, для бозонов получим следующий результат:

$$\begin{aligned} \langle T_C a(t^\alpha) a^+(t_3^\beta) a^+(t_1^\gamma) a(t_2^\delta) \rangle &= \\ &= 2n^2 + \\ &+ n\theta_C(t^\alpha - t_1^\gamma) + n\theta_C(t_2^\delta - t_1^\gamma) + n\theta_C(t^\alpha - t_3^\beta) + \\ &+ n\theta_C(t_2^\delta - t_3^\beta) + \theta_C(t^\alpha - t_3^\beta)\theta_C(t_2^\delta - t_1^\gamma) + \\ &+ \theta_C(t^\alpha - t_1^\gamma)\theta_C(t_2^\delta - t_3^\beta) = \\ &= [\theta_C(t^\alpha - t_3^\beta) + n][\theta_C(t_2^\delta - t_1^\gamma) + n] + \\ &+ [\theta_C(t^\alpha - t_1^\gamma) + n][\theta_C(t_2^\delta - t_3^\beta) + n]. \end{aligned} \quad (366)$$

Но возникающие комбинации $[\theta_C(t^\alpha - t_1^\gamma) - n]$ и есть келдышевские функции Грина $G^{\alpha\beta}$ (37) (с точностью до "i"). То есть T -упорядоченное среднее распалось на произведение T -упорядоченных средних пар операторов.

При усреднении по матрице плотности гиббсовского вида бозонные операторы обладают свойством

$$\langle (a^+)^k (a)^k \rangle = k! n^k, \quad n = \langle a^+ a \rangle. \quad (367)$$

Поэтому в случае любого числа $2m$ бозе-операторов (m операторов рождения и m уничтожения) после усреднения правой части формулы Вика возникает структура вида:

$$\sum_{k=0}^m k! n^k \sum_{P(m-k)} \prod \theta_C(t_i - t_j), \quad (368)$$

где значок $\sum_{P(m-k)}$ означает, что надо просуммировать по всем возможным выборам $m-k$ пар времён из исходных $2m$ времён произведения $m-k$ тэта-функций от этих времён. Но такая сумма в точности равна произведению

$$\sum_{P(m)} \prod [\theta_C(t_i - t_j) + n], \quad (369)$$

т.е. сумме всех возможных произведений одночастичных функций Грина.

Для фермионов тот же пример с четырьмя операторами даст такой результат:

$$\begin{aligned} \langle T_C a(t^\alpha) a^+(t_3^\beta) a^+(t_1^\gamma) a(t_2^\delta) \rangle = \\ = 0 - \\ - n\theta_C(t^\alpha - t_1^\gamma) + n\theta_C(t_2^\delta - t_1^\gamma) + n\theta_C(t^\alpha - t_3^\beta) - \\ - n\theta_C(t_2^\delta - t_3^\beta) - \theta_C(t^\alpha - t_3^\beta)\theta_C(t_2^\delta - t_1^\gamma) + \\ + \theta_C(t^\alpha - t_1^\gamma)\theta_C(t_2^\delta - t_3^\beta). \end{aligned} \quad (370)$$

Для фермионов нет членов с a^k при $k > 1$, поэтому и $\langle \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} \rangle = 0$. Этот нуль оставлен в уравнении в явном виде. Записав его как $(n^2 - n^2)$, опять удастся выражение (370) представить в виде произведения одночастичных функций Грина:

$$\begin{aligned} \langle T_C a(t^\alpha) a^+(t_3^\beta) a^+(t_1^\gamma) a(t_2^\delta) \rangle = \\ = -[\theta_C(t^\alpha - t_3^\beta) - n][\theta_C(t_2^\delta - t_1^\gamma) - n] + \\ + [\theta_C(t^\alpha - t_1^\gamma) - n][\theta_C(t_2^\delta - t_3^\beta) - n]. \end{aligned} \quad (371)$$

Для фермионов смена знака при нечётной перестановке операторов автоматически приводит к тому, что в сумме произведений m функций Грина, аналогично таковой для бозонов:

$$\sum_{P(m-k)} (-1)^P \prod [\theta_C(t_i - t_j) - n], \quad (372)$$

хотя формально и будут присутствовать члены с n^k с $k \geq 2$, но для каждого такого члена всегда найдётся точно такой же, но противоположного знака. Поэтому и для фермионов среднее от T -упорядоченного произведения может быть записано в виде суммы T -произведений попарных средних.

Алгебраический вывод теоремы Вика позволяет легко обобщить НДТ на случай, когда в начальном состоянии есть корреляции между частицами в разных состояниях. Впервые это обобщение было сформулировано в работе Холла (Hall) [25], а потом в работе Кухаренко, Тиходева [26] было показано, как строятся кинетические уравнения для системы с начальными корреляциями. Если вернуться к теореме Вика в операторном виде (365), которая верна и при наличии корреляций, то легко понять, что отличие системы с начальными корреляциями от системы невзаимодействующих частиц заключается только в том, что средние от N -упорядоченных произведений не будут распадаться на произведения чисел заполнения частиц в отдельных состояниях. Собственно, наличие корреляций в начальный момент времени и означает, что для двух разных состояний "1" и "2":

$$\langle \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \hat{a}_1 \rangle \neq n_1 n_2. \quad (373)$$

Также могут существовать и тройные корреляции, и корреляции более высоких порядков. Для невзаимодействующих частиц отсутствие корреляций позволяло проводить независимо усреднение операторов для разных состояний. Теперь при усреднении операторного равенства (365) появляются корреляционные функции, не позволяющие провести рассуждения, начинающиеся с этой формулы отдельно для каждого состояния. Средние от нормально упорядоченного произведения операторов не распадаются на произведение одночастичных чисел заполнения. Такие средние образуют корреляционные

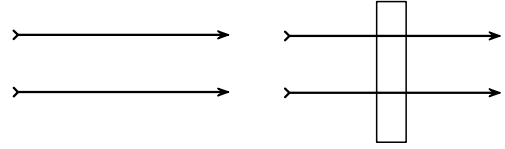


Рис. 43. Парный корреляционный блок, заменяющий две независимые линии функций Грина отдельных частиц.

блоки, выступающие теперь в качестве дополнительных элементов диаграммной техники. Так, если в системе есть только двухчастичные корреляции, то удобно ввести корреляционные функции следующего вида:

$$K(1, 2) = \langle \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \hat{a}_1 \rangle - n_1 n_2. \quad (374)$$

Тогда любые две пары точек на диаграмме, соединённые ранее двумя отдельными одночастичными линиями, теперь могут быть соединены и корреляционным блоком $K(1, 2)$ (рис. 43). При этом, поскольку корреляционные блоки возникают из нормально упорядоченных наборов операторов, эти блоки одинаковы для диаграмм с любым расположением индексов "–, +" на их концах. Значит, к любой обычной диаграмме, содержащей две функции Грина 1-го и 2-го состояний, необходимо прибавить ещё точно такую же диаграмму, но с корреляционным блоком $K(1, 2)$, соединяющим те же точки на диаграмме. Этот рисунок можно интерпретировать и так: при наличии корреляций рисуются обычные диаграммы, а потом две функции Грина коррелированных состояний соединяются двумя поперечными линиями в один блок

$$\begin{aligned} G_{11}^{\alpha\beta}(t, t_1) G_{22}^{\gamma\delta}(t_2, t_3) \rightarrow \\ \rightarrow K(1, 2) \exp[-i\varepsilon_1(t - t_1)] \exp[-i\varepsilon_1(t_2 - t_3)], \end{aligned} \quad (375)$$

при любых келдышевских индексах $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

Конкретные правила для корреляционных блоков более высокого порядка зависят от того, как определять высшие корреляционные функции (например, если высшие корреляторы не распадаются на произведение более простых, то в любую диаграмму входит только один корреляционный блок какого-то порядка). Из-за того что корреляционный блок представляет собой матрицу, в которой все элементы равны 1, диаграмма обращается в нуль, если в ней есть часть, связанная с остальной частью диаграммы только через корреляционные блоки. Механизм этого аналогичен обращению в нуль сумм замкнутых петель в НДТ.

В работе [26] было показано, что в диаграммных рядах, содержащих корреляционные блоки, возникают секулярные расходимости. Поэтому от интегральных уравнений надо переходить к кинетическим уравнениям, определяющим, как меняются начальные корреляции с течением времени. Надо заметить, что, так же как и числа заполнения, корреляционные функции с течением времени забывают про свои начальные значения и определяются только взаимодействием и внешними полями, действующими на систему.

Приведём простейший пример вычислений в технике с корреляциями. Возьмём систему с двумя скоррелированными электронами в двух разных состояниях, которые обозначим "1" и "2" (состояния с разными спинами на одном уровне, состояния с разным моментом в атоме

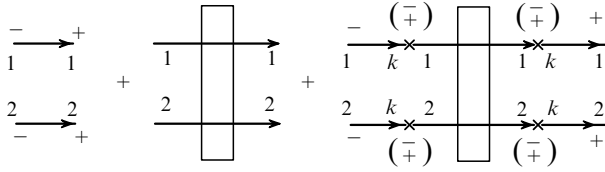


Рис. 44. Диаграммы, определяющие парную корреляционную функцию $K_{12}(t)$. В середине стоит корреляционный блок, задающий начальные парные корреляции двух электронных состояний.

или квантовой точке и т.п.), и "подключим" эти состояния туннельными переходами с матричными элементами T_{1k} и T_{2k} к термостату, открывая возможность для каждого электрона уходить из начального состояния (см. туннельный гамильтониан (310)). Для того чтобы проследить за изменением начальной корреляции со временем, надо найти парную функцию этих двух электронов $\Gamma_{12}^<(t, t') = -i\langle a_1^+(t')a_2^+(t')a_2(t)a_1(t) \rangle$, которая при совпадающих временах и даст значение коррелятора $K_{12}(t) = i\Gamma_{12}^<(t, t)$. Диаграммы для такой парной функции показаны на рис. 44.

Из-за суммирования по индексам " $\pm$ " в вершинах, примыкающих к корреляционному блоку, четыре концевые функции Грина превращаются в функции R и A . Например:

$$T_{1k}(G_{1k}^{--} - G_{1k}^{+-}) = T_{1k}G_{1k}^R. \quad (376)$$

Поэтому аналитическое выражение, соответствующее диаграмме на рис. 44, имеет вид:

$$\begin{aligned} \Gamma_{12}^<(t, t') &= iG_{11}^<(t, t')G_{22}^<(t, t') - \\ &- iK_{12}(0) \exp[-i(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(t - t')] + \\ &+ T_{1k}^2 T_{2k}^2 \int_0^\infty dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 \sum_{k, k', k'', k'''} G_{1k}^R(t, t_1) G_{2k'}^R(t, t_2) \times \\ &\times \exp(-i\varepsilon_1 t_1 - i\varepsilon_2 t_2) K_{12}(0) \exp(i\varepsilon_1 t_3 + i\varepsilon_2 t_4) \times \\ &\times G_{k''1}^A(t_3, t') G_{k''2}^A(t_4, t'). \end{aligned} \quad (377)$$

Уравнение Дайсона для одночастичной функции, обычное для туннельной системы:

$$\begin{aligned} G_{1k}^R(t, t') &= T_{1k} \int_0^\infty dt_1 G_{11}^{0R}(t, t_1) G_k^{0R}(t_1, t') + \\ &+ T_{1k}^2 \int_0^\infty dt_1 dt_2 \sum_{k'} G_{11}^{0R}(t, t_1) G_{k'}^{0R}(t_1, t_2) G_{1k}^R(t_2, t'). \end{aligned} \quad (378)$$

После несложных вычислений для $K_{12}(t) = i\Gamma_{12}^<(t, t) + G_1^{0<} G_2^{0<}$ получим:

$$K_{12}(t) = K_{12}(0) [1 - (1 - \exp(-\gamma_1 t))^2 (1 - \exp(-\gamma_2 t))^2], \quad (379)$$

где $\gamma_{1,2} = \pi T_{(1k, 2k)}^2 v_k$ — обычные скорости туннельных переходов.

Видно, что начальные корреляции экспоненциально затухают, как только есть обмен частицами с термостатом. Такое исчезновение памяти о начальных корреляциях является достаточно общим явлением, поэтому эта техника, по сути, нужна только для описания переходных процессов.

Список литературы

1. Келдыш Л В *ЖЭТФ* **47** 1515 (1964); Keldysh L V *Sov. Phys. JETP* **20** 1018 (1965)
2. Элиашберг Г М *ЖЭТФ* **41** 1241 (1961); Éliashberg G M *Sov. Phys. JETP* **14** 886 (1962); Элиашберг Г М *ЖЭТФ* **42** 1658 (1962); Éliashberg G M *Sov. Phys. JETP* **15** 1151 (1962)
3. Caroli C et al. *J. Phys. C Solid State Phys.* **4** 916 (1971)
4. Caroli C et al. *J. Phys. C Solid State Phys.* **4** 2598 (1971)
5. Caroli C et al. *J. Phys. C Solid State Phys.* **5** 21 (1972)
6. Meir Y, Wingreen N S *Phys. Rev. Lett.* **68** 2512 (1992)
7. Haug H, Jauho A-P *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Berlin: Springer, 1996)
8. Feynman R P *Phys. Rev.* **76** 769 (1949)
9. Dyson F J *Phys. Rev.* **75** 1736 (1949)
10. Иваненко Д Д (Ред.) *Новейшее развитие квантовой электродинамики. Сборник статей* (М.: ИЛ, 1954) с. 161, 205
11. Matsubara T *Prog. Theor. Phys.* **14** 351 (1955)
12. Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *ЖЭТФ* **36** 900 (1959); Abrikosov A A, Gor'kov L P, Dzyaloshinskii I E *Sov. Phys. JETP* **9** 636 (1959)
13. Фрадкин Е С *ЖЭТФ* **36** 1286 (1959); Fradkin E S *Sov. Phys. JETP* **9** 912 (1958); *Nucl. Phys.* **12** 465 (1959)
14. Дзялошинский И Е *ЖЭТФ* **42** 1126 (1962); Dzyaloshinskii I E *Sov. Phys. JETP* **15** 778 (1962)
15. Горьков Л П, Элиашберг Г М *ЖЭТФ* **54** 612 (1968); Gor'kov L P, Eliashberg G M *Sov. Phys. JETP* **27** 328 (1968)
16. Mills R, Preprint (1962)
17. Keldysh L V, in *Progress in Nonequilibrium Green's Functions. Proc. of the Conf. Kadanoff–Baym Equations: Progress and Perspectives for Many-Body Physics, Rostock, Germany, 20–24 September 1999* (Ed. M Bonitz) (Singapore: World Scientific, 2003) p. 4
18. Константинов О В, Перель В И *ЖЭТФ* **39** 197 (1960); Konstantinov O V, Perel' V I *Sov. Phys. JETP* **12** 142 (1961)
19. Горьков Л П *ЖЭТФ* **34** 735 (1958); Gor'kov L P *Sov. Phys. JETP* **7** 505 (1958); Абрикосов А А, Горьков Л П, Халатников И М *ЖЭТФ* **35** 265 (1958); Abrikosov A A, Gor'kov L P, Khalatnikov I M *Sov. Phys. JETP* **8** 182 (1959); Ландау Л Д *ЖЭТФ* **34** 262 (1958); Landau L D *Sov. Phys. JETP* **7** 182 (1958); Мигдал А Б *ЖЭТФ* **32** 399 (1957); Migdal A B *Sov. Phys. JETP* **5** 333 (1957); Мигдал А Б *ЖЭТФ* **35** 1438 (1958); Migdal A B *Sov. Phys. JETP* **7** 996 (1958); Галицкий В М, Мигдал А Б *ЖЭТФ* **34** 139 (1957); Galitskii V M, Migdal A B *Sov. Phys. JETP* **7** 96 (1958); Галицкий В М *ЖЭТФ* **34** 151 (1957); Galitskii V M *Sov. Phys. JETP* **7** 104 (1958); Беляев С Т *ЖЭТФ* **34** 417 (1958); Beliaev S T *Sov. Phys. JETP* **7** 289 (1958); Беляев С Т *ЖЭТФ* **34** 433 (1958); Beliaev S T *Sov. Phys. JETP* **7** 299 (1958)
20. Киржниц Д А *Полевые методы теории многих частиц* (М.: Госатомиздат, 1963); Пер. на англ. яз.: Kirzhnits D A *Field Theoretical Methods in Many-Body Systems* (Oxford: Pergamon Press, 1967)
21. Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1962); Пер. на англ. яз.: Abrikosov A A, Gor'kov L P, Dzyaloshinskii I E *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (New York: Dover Publ., 1975)
22. Schwinger J J. *Math. Phys.* **2** 407 (1961)
23. Craig R A J. *Math. Phys.* **9** 605 (1968)
24. Mills R *Propagators for Many-Particle Systems. An Elementary Treatment* (New York: Gordon and Breach, 1969)
25. Hall A G J. *Phys. A Math. Gen.* **8** 214 (1975); *Physica A* **80** 369 (1975)
26. Кухаренко Ю А, Тиходеев С Г *ЖЭТФ* **83** 1444 (1982); Kukharenko Yu A, Tikhodeev S G *Sov. Phys. JETP* **56** 831 (1982)
27. Wick G C *Phys. Rev.* **80** 268 (1950)
28. Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Физическая кинетика* (М.: Физматлит, 2002); Пер. на англ. яз.: Lifshitz E M, Pitaevskii L P *Physical Kinetics* (Oxford: Pergamon Press, 1981)
29. Kadanoff L P, Baym G *Quantum Statistical Mechanics. Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems* (New York: W.A. Benjamin, 1962); Пер. на русск. яз.: Каданов Л П, Бейм Г *Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов* (М.: Мир, 1964)
30. Schuster H G, Vieira V R *Phys. Rev. B* **34** 189 (1986)
31. Moyal J E *Proc. Camb. Phil. Soc.* **45** 99 (1949)
32. Климонтович Ю Л, Силин В П *УФН* **70** 247 (1960); Klimontovich Yu L, Silin V P *Sov. Phys. Usp.* **3** 84 (1960)

33. Kubo R J. *Phys. Soc. Jpn.* **12** 570 (1957)
34. Niemi A J, Semenoff G W *Ann. Physics* **152** 105 (1984); *Nucl. Phys. B* **230** 181 (1984)
35. Matsumoto H, Nakano Y, Umezawa H J. *Math. Phys.* **25** 3076 (1984)
36. Дюгаев В К, Хмельницкий Д Е *ЖЭТФ* **90** 1871 (1986); Dugaev V K, Khmel'nitskii D E *Sov. Phys. JETP* **63** 1097 (1986)
37. Umezawa H, Matsumoto H, Tachiki M *Thermo Field Dynamics and Condensed States* (Amsterdam: North-Holland, 1982)
38. Vieira V R, Pimentel I R *Phys. Rev. B* **39** 7196 (1989)
39. Rammer J, Smith H *Rev. Mod. Phys.* **58** 323 (1986)
40. Боголюбов Н Н, Толмачев В В, Ширков Д В *Новый метод в теории сверхпроводимости* (М.: Изд-во АН СССР, 1958); Пер. на англ. яз.: Bogoliubov N N, Tolmachev V V, Shirkov D V *A New Method in the Theory of Superconductivity* (New York: Consultants Bureau, 1959)
41. Anderson P W *Phys. Rev.* **112** 1900 (1958)
42. Schrieffer J R *Theory of Superconductivity* (New York: W.A. Benjamin, 1964); Пер. на русск. яз.: Шриффер Дж *Теория сверхпроводимости* (М.: Наука, 1970)
43. Арсеев П И, Лойко С О, Федоров Н К *УФН* **176** 3 (2006); Arseev P I, Loiko S O, Fedorov N K *Phys. Usp.* **49** 1 (2006)
44. Ambegaokar V, Kadanoff L P *Nuovo Cimento* **22** 914 (1961)
45. Jauho A-P, Wingreen N S, Meir Y *Phys. Rev. B* **50** 5528 (1994)
46. Büttiker M *Phys. Rev. B* **46** 12485 (1992)
47. Blanter Y M, Büttiker M *Phys. Rep.* **336** 1 (2000)
48. Nazarov Y V (Ed.) *Quantum Noise in Mesoscopic Physics* (Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 2003)
49. Haupt F, Novotný T, Belzig W *Phys. Rev. B* **82** 165441 (2010)
50. Novotný T, Haupt F, Belzig W *Phys. Rev. B* **84** 113107 (2011)
51. Zhu J-X, Balatsky A V *Phys. Rev. B* **67** 165326 (2003)
52. Galperin M, Nitzan A, Ratner M A *Phys. Rev. B* **74** 075326 (2006)
53. Conley J W, Mahan G D *Phys. Rev.* **161** 681 (1967)
54. Viljas J K et al. *Phys. Rev. B* **72** 245415 (2005)
55. Yu L H et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 266802 (2004)
56. Chen Z-Z, Lü R, Zhu B *Phys. Rev. B* **71** 165324 (2005)
57. Tikhodeev S G, Ueba H *Phys. Rev. B* **70** 125414 (2004)
58. Ueba H, Mii T, Tikhodeev S G *Surf. Sci.* **601** 5220 (2007)
59. Arseyev P I, Maslova N S *Письма в ЖЭТФ* **82** 331 (2005); *JETP Lett.* **82** 297 (2005)
60. Арсеев П И, Маслова Н С *Письма в ЖЭТФ* **85** 304 (2007); Arseev P I, Maslova N S *JETP Lett.* **85** 251 (2007)
61. Арсеев П И, Маслова Н С *УФН* **180** 1197 (2010); Arseev P I, Maslova N S *Phys. Usp.* **53** 1151 (2010)
62. Shchadilova Y E et al. *Phys. Rev. B* **89** 165418 (2014)
63. Arseyev P I, Maslova N S *Письма в ЖЭТФ* **84** 99 (2006); *JETP Lett.* **84** 93 (2006)
64. Rocha A R et al. *Phys. Rev. B* **73** 085414 (2006)
65. Brandbyge M et al. *Phys. Rev. B* **65** 165401 (2002)
66. Montgomery M J et al. *J. Phys. Condens. Matter* **15** 731 (2003)
67. Старостин А Н, Чесноков М А *ЖЭТФ* **124** 1367 (2003); Starostin A N, Chesnokov M A *JETP* **97** 1219 (2003)
68. Bergeret F S, Verso A, Volkov A F *Phys. Rev. B* **86** 214516 (2012)
69. Bergeret F S, Giazotto F *Phys. Rev. B* **88** 014515 (2013)
70. Chen W, Clerk A A *Phys. Rev. B* **86** 125443 (2012)
71. Zhou L-L et al. *Phys. Rev. B* **83** 195303 (2011)
72. Crépeux A et al. *Phys. Rev. B* **83** 153417 (2011)
73. Kaasbjerg K, Nitzan A *Phys. Rev. Lett.* **114** 126803 (2015)
74. Komnik A, Gogolin A O *Phys. Rev. B* **66** 035407 (2002)
75. Gutman D B, Gefen Y, Mirlin A D *Phys. Rev. B* **81** 085436 (2010)
76. Protopopov I V, Gutman D B, Mirlin A D *Phys. Rev. Lett.* **110** 216404 (2013)
77. Dinh S N, Bagrets D A, Mirlin A D *Phys. Rev. B* **88** 245405 (2013)
78. Lutchyn R M, Skrabacz J H *Phys. Rev. B* **88** 024511 (2013)
79. Gamboa Saravi R E, Naón C M, Schaposnik F A *J. Stat. Mech.* P09034 (2014); arXiv:1406.4578
80. Иванов А Л, Келдыш Л В *ЖЭТФ* **84** 404 (1982); Ivanov A L, Keldysh L V *Sov. Phys. JETP* **57** 234 (1983)
81. Schmitt-Rink S, Chemla D S, Haug H *Phys. Rev. B* **37** 941 (1988)
82. Jauho A P, Johnsen K *Phys. Rev. Lett.* **76** 4576 (1996)
83. Попов Ю М *Труды ФИАН* **31** 3 (1965)
84. Галицкий В М, Елесин В Ф *Резонансное взаимодействие электромагнитных полей с полупроводниками* (М.: Энергоатомиздат, 1986)
85. El Sayed K et al. *Phys. Rev. B* **49** 7337 (1994)
86. Vu Q T, Haug H, Keldysh L V *Solid State Commun.* **115** 63 (2000)
87. Wacker A, Jauho A-P *Phys. Rev. Lett.* **80** 369 (1998)
88. Wacker A et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 836 (1999)
89. Wacker A *Phys. Rev. B* **66** 085326 (2002)
90. Banit F et al. *Appl. Phys. Lett.* **86** 041108 (2005)
91. de Leeuw A-W, Stoof H T C, Duine R A *Phys. Rev. A* **88** 033829 (2013)
92. Abrikosov A A *Physics* **2** (1) 5 (1965)
93. Barnes S E J. *Phys. F Met. Phys.* **6** 1375 (1976)
94. Coleman P *Phys. Rev. B* **29** 3035 (1984)
95. Kotliar G et al. *Rev. Mod. Phys.* **78** 865 (2006)
96. Goldin Y, Avishai Y *Phys. Rev. B* **61** 16750 (2000)
97. Paaske J, Rosch A, Wölffe P *Phys. Rev. B* **69** 155330 (2004)
98. Paaske J et al. *Phys. Rev. B* **70** 155301 (2004)
99. Арсеев П И, Маслова Н С, Рубцов А Н *Новые диаграммные методы современных теоретических исследований сильнокоррелированных электронных систем* (М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2011)
100. Arseyev P I, Maslova N S *Письма в ЖЭТФ* **100** 218 (2014); *JETP Lett.* **100** 197 (2014)
101. Georges A et al. *Rev. Mod. Phys.* **68** 13 (1996)
102. Horbach M L, Schön G *Physica A* **167** 93 (1990); *Ann. Physik* **505** 51 (1993)
103. Kobes R L, Semenoff G W, Weiss N Z. *Phys. C* **29** 371 (1985)
104. Kamenev A, Andreev A *Phys. Rev. B* **60** 2218 (1999)
105. Kamenev A, Levchenko A *Adv. Phys.* **58** 197 (2009)
106. Chamon C, Ludwig A W W, Nayak Ch *Phys. Rev. B* **60** 2239 (1999)
107. Финкельштейн А М *ЖЭТФ* **84** 168 (1983); Finkel'shtein A M *Sov. Phys. JETP* **57** 97 (1983)
108. Schwiete G, Finkel'stein A M *Phys. Rev. B* **89** 075437 (2014)
109. Semenoff G W, Umezawa H *Nucl. Phys. B* **220** 196 (1983)
110. Lutz M, Kunihiro T Z. *Phys. C* **49** 123 (1991)
111. Akhmedov E T, Astrakhantsev N, Popov F K *JHEP* (09) 071 (2014); arXiv:1405.5285
112. Констандин Т *УФН* **183** 785 (2013); Konstandin T *Phys. Usp.* **56** 747 (2013)
113. Akhmedov E T *Phys. Rev. D* **87** 044049 (2013)
114. Barvinsky A O *Phys. Rev. D* **85** 104018 (2012)

On the nonequilibrium diagram technique: derivation, some features and applications

P.I. Arseev

Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Leninskii prosp. 53, 119991 Moscow, Russian Federation
E-mail: ars@lpi.ru

The logic of the nonequilibrium diagram technique (Keldysh diagram technique) appearance is reviewed. Simple examples are used to illustrate the implementation of the technique and to demonstrate possible difficulties and how to overcome them. Together with the well known facts, some lesser-discussed details are considered, in particular, whether the so-called three-component technique is necessary. A number of examples of nonequilibrium diagram technique (NDT) applications are given, including in particular tunneling systems, the linear response and other problems. We hope that some parts of the review will be useful even for those people for whom nonequilibrium diagram technique is well familiar.

Keywords: diagram technique, nonequilibrium diagram technique, Keldysh diagram technique, nonequilibrium processes, quantum kinetics

PACS numbers: **03.70.+k**, **05.60.Gg**, **11.10.Wx**, **72.10.Bg**

Bibliography — 114 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **185** (12) 1271 – 1321 (2015)

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201512b.1271

Received 4 August 2015, revised 11 October 2015

Physics – Uspekhi **58** (12) (2015)