1960 г. Май *Т. LXXI, вып. 1*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

ДВУХВРЕМЕННЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Д. Н. Зубарев

СОДЕРЖАНИЕ

§ 1. Введение 71
§ 2. Двухвременные температурные функции Грина 72
§ 3. Спектральные представления 77
§ 4. Функции Грина в теории необратимых процессов 83
§ 5. Идеальные квантовые газы 87
§ 6. Приложение к теории сверхпроводимости 89
§ 7. Приложение к теории ферромагнетизма 101
§ 8. Взаимодействие электронов с решеткой 105
§ 9. Выводы 114
Цитированная литература 115

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Методы современной квантовой теории поля за последнее время все более проникают в статистическую физику. Это связано с тем, что основные задачи в той и другой области имеют много общего. Задача о частице, взаимодействующей с квантованным полем, или о системе взаимодействующих полей формулируется в терминах вторично-квантованных гамильтонианов (или лагранжианов), так же как и задача о системе взаимодействующих частиц—основная проблема статистической механики. Особенность статистической механики состоит в том, что в ней мы имеем дело с «большими» системами, предполагая, что число частиц весьма велико, и интересуемся лишь асимптотическими свойствами таких систем, когда число частиц N стремится к бесконечности (при $V/N = \mathrm{const}$, где V—объем системы). Это создает своеобразные трудности при применении теории возмущений в статистической механике, так как операторы возмущения не малы и могут давать члены, пропорциональные степеням объема V, которые в целом должны, разумеется, взаимно компенсироваться. Эти трудности разрешены сравнительно недавно созданием регулярной теории возмущений для больших систем, использующей разложения по связным диаграммам. Такая теория разработана как для случая нулевой температуры (Ван-Хове [1], Голдстоун [2], Гугенгольц [3]), так и для отличной от нуля температуры (Дайсон [4], Блох и Де-Доминичис [5]).

Для систем, изучаемых в статистической механике, характерно, что уровни энергии расположены весьма плотно, так что расстояние между ними стремится к нулю при $V \to \infty$. Следовательно, спектр практически непрерывен и энергия возмущения всегда больше расстояния между уровнями. В этом случае, строго говоря, надо пользоваться теорией возмущений для непрерывного спектра. Поэтому здесь особенно важна разработка методов, не основанных непосредственно на теории возмущений.

Одним из важных понятий квантовой теории поля являются функции Грина, которые удобны для изучения свойств взаимодействующих квантованных полей [6]. Использование этих понятий оказывается полезным и в статистической механике. Применение функций Грина позволяет, например, получить регулярные (не содержащие высших степеней объема) разложения для энергии (Клейн и Прэйндж[7]), таким образом здесь не возникает трудностей с применением теории возмущений к большим системам. Применение функций Грина оказывается полезным в тех случаях, когда удается отсуммировать некоторые классы диаграмм теории возмущений. С помощью функций Грина процедуры такого рода выполняются проще.

В квантовой теории поля применение функций Грина оказалось особенно плодотворным при одновременном использовании спектральных представлений, типа соотношений Лемана—Челена [8]. В статистической механике спектральные представления для временных корреляционных функций и запаздывающих функций Грина были впервые установлены и использовались в теории флюктуаций и статистической механике необратимых процессов начиная с работ Велтона и Келлена[9] (см. статью Кубо[10]).

Спектральные теоремы для причинных временных функций Грина были рассмотрены в [11] для нулевой температуры и в [12] для температуры, отличной от нуля, и использованы для различных задач статистической механики в работах [11a–18, 51–52, 7,61].

В настоящей статье мы не будем касаться всех работ по применению функций Грина в статистической физике, отсылая читателя к цитированной литературе (см. также [50,53,54,66–69]). Зато мы остановимся более подробно на одном направлении, которое представляется нам весьма перспективным—применении двухвременных температурных функций Грина (запаздывающих и опережающих). Мы изложим кратко основные свойства температурных двухвременных функций Грина (§§ 2—3) и их простейшие применения к теории необратимых процессов (§ 4), к теории сверхпроводимости (§ 6), к ферромагнетизму (§ 7), к системе электронов, взаимодействующих с решеткой в нормальных металлах и полупроводниках (§ 8). В приложениях мы будем, следуя работе Боголюбова и Тябликова [19], пользоваться не причинными функциями Грина, как это делается обычно, а двухвременными запаздывающими и опережающими функциями Грина. Как мы убедимся, они весьма удобны для применения в статистике, так как допускают аналитическое продолжение в комплексную плоскость. Иногда в статистической механике используются также температурные мацубаровские функции Грина[20], которые не зависят от времени, однако, повидимому, они менее удобны, чем температурные временные функции Грина.

§ 2. ДВУХВРЕМЕННЫЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

2.1. Причинные, запаздывающие и опережающие функции Грина

Функции Грина в статистической механике являются удобным обобщением понятия корреляционных функций. Так же, как и последние, они тесно связаны с вычислением наблюдаемых величин и представляют известные преимущества при построении и решении уравнений.

В статистической механике, как и в квантовой теории поля, можно рассматривать функции Грина различного типа, например: причинные двухвременные функции Грина $G_c(t, t')$, определяемые через среднее

значение T-произведения операторов, или запаздывающие и опережающие функции Грина $G_r(t, t')$ и $G_a(t, t')$:

$$G_c(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_c = -i \langle TA(t)B(t') \rangle, \tag{2,1а}$$

$$G_r(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r = -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle, \tag{2,1б}$$

$$G_a(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_a = i\theta(t'-t) \langle [A(t), B(t')] \rangle, \tag{2,1в}$$

где $\langle \ldots \rangle$ означает, что производится усреднение по большому каноническому ансамблю Гиббса, $\langle\langle A(t)B(t') \rangle\rangle_{c,r,a}$ — краткое обозначение для соответствующих функций Грина.

$$\langle \ldots \rangle = Q^{-1}\mathrm{Sp}\left(e^{-\frac{\mathscr{H}}{\theta}} \ldots\right) \quad (\theta = kT), \tag{2,2}$$

$$Q = \mathrm{Sp}\left(e^{-\frac{\mathscr{H}}{\theta}}\right) = e^{-\frac{\Omega}{\theta}} \tag{2,3}$$

(Q — статистическая сумма для большого ансамбля Гиббса, Ω — термодинамический потенциал в переменных V, θ, μ). Оператор $\mathscr{H}$ включает член с химическим потенциалом μ

$$\mathscr{H} = H - \mu N. \tag{2,4}$$

H — оператор Гамильтона, не зависящий от времени, N — оператор полного числа частиц; $A(t)$, $B(t)$ — гейзенберговское представление для операторов A, B, которые выражаются через произведение квантованных полевых функций (или операторов порождения и уничтожения частиц)*,

$$A(t) = e^{i\mathscr{H}t} A e^{-i\mathscr{H}t} \tag{2,5}$$

(здесь и далее мы принимаем систему единиц, в которой $\hbar = 1$).

Символ T означает хронологическое или T-произведение операторов, которое определяется как обычно

$$TA(t)B(t') = \theta(t-t')A(t)B(t') + \eta\theta(t'-t)B(t')A(t), \tag{2,6}$$

где

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0, \end{cases} \quad \eta = \pm 1$$

Наконец, $[A, B]$ означает коммутатор или антикоммутатор

$$[A, B] = AB - \eta BA, \quad \eta = \pm 1. \tag{2,7}$$

Знак η в формулах (2,6), (2,7) выбирается плюс или минус из соображений удобства в задаче. Если A, B — бозе-операторы, обычно выбирают знак плюс, а если ферми — минус, но возможен и другой выбор знака η. Вообще говоря, A и B не являются ни бозевскими, ни фермиевскими, так как произведения операторов могут удовлетворять более сложным перестановочным соотношениям. Для многовременных функций Грина знак η определяется обычно однозначно, в зависимости от четности перестановки входящих в них ферми-операторов при переходе к хронологическому порядку (см. (2,13)).

С учетом (2,6), (2,7) определения (2,1а, б, в) запишем в виде

$$G_c(t, t') = -i\theta(t-t') \langle A(t)B(t') \rangle - i\eta\theta(t'-t) \langle B(t')A(t) \rangle, \tag{2,8а}$$

$$G_r(t, t') = -i\theta(t-t') \{\langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle\}, \tag{2,8б}$$

$$G_a(t, t') = i\theta(t'-t) \{\langle A(t)B(t') \rangle - \eta \langle B(t')A(t) \rangle\}, \ (\eta = \pm 1). \tag{2,8в}$$

---

*) Функции Грина из операторов в гейзенберговском представлении с $\mathscr{H} = H - \mu N$ применялись в работах [51], [13], [19].

Заметим, что в точке совпадения временных аргументов $t=t'$ функции Грина (2,8) не определены из-за разрывного множителя $\theta(t-t')$. Эта неопределенность хорошо известна из квантовой теории поля.

Из определения (2,1) – (2,8) мы видим, что применяемые в статистике функции Грина отличаются от полевых функций Грина лишь способом усреднения. Вместо усреднения по нижнему, вакуумному состоянию системы производится усреднение по большому каноническому ансамблю Гиббса (2,2). Следовательно, в статистике функции Грина зависят как от времени, так и от температуры. Очевидно, что при стремлении температуры к нулю функции Грина (2,1) переходят в обычные полевые функции Грина.

Применение большого ансамбля Гиббса не случайно. Он очень удобен тем, что при работе с ним не нужно учитывать дополнительного ограничения на постоянство полного числа частиц, как, например, в каноническом ансамбле Гиббса, и числа заполнения различных состояний независимы.

Заметим, что функции Грина $G_c(t, t')$, $G_r(t, t')$ и $G_a(t, t')$ для случая статистического равновесия зависят от t и t' лишь в виде разности. Рассмотрим, например, $G_c(t, t')$ и запишем ее в явном виде, воспользовавшись перестановочностью операторов под знаком шпура

$$G_c(t, t') = -i\theta(t-t')Q^{-1}\operatorname{Sp}\{e^{\mathscr{H}[i(t-t')-\beta]}Ae^{-i\mathscr{H}(t-t')}B\} -$$
$$-i\eta\theta(t'-t)Q^{-1}\operatorname{Sp}\{e^{\mathscr{H}[i(t'-t)-\beta]}Be^{i\mathscr{H}(t'-t)}A\}\left(\beta=\frac{1}{\theta}\right). \quad (2,9)$$

Таким образом, действительно $G_c(t, t')$ зависит лишь от $t-t'$. Повторяя эти рассуждения для $G_r(t, t')$ и $G_a(t, t')$, убеждаемся, что они зависят лишь от $t-t'$:

$$G_c(t, t')=G_c(t-t'),\ G_r(t, t')=G_r(t-t'),\ G_a(t, t')=G_a(t-t'). \quad (2,10)$$

Мы ввели температурные функции Грина (2,1) пока чисто формально, по аналогии с квантовой теорией поля. Далее мы убедимся на конкретных примерах, что они весьма удобны для применений в квантовой статистике к задачам о системе из большого числа взаимодействующих частиц. В качестве операторов A и B можно выбрать операторы различного типа: например, операторы ферми или бозе и их произведения (§§ 6, 8), операторы Паули и их произведения (§ 7), операторы плотности или операторы токов (§§ 4, 8). Выбор операторов A и B определяется условиями задачи.

Функции Грина (2,1) являются двухвременными функциями Грина в отличие от причинных многовременных функций Грина

$$G_c(\mathbf{x}_1, t_1, \ldots, \mathbf{x}_n t_n;\ \mathbf{x}_1' t_1', \ldots, \mathbf{x}_n' t_n') =$$
$$=(\ \ i)^n\langle T\psi(\mathbf{x}_1 t_1), \ldots, \psi(\mathbf{x}_n t_n)\psi^+(\mathbf{x}_1' t_1'), \ldots, \psi^+(\mathbf{x}_n' t_n')\rangle, \quad (2,11)$$

где $\psi(\mathbf{x}, t)$, $\psi^+(\mathbf{x}, t)$ — вторично квантованные полевые функции в представлении Гейзенберга

$$\left.\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}, t)&=\sum_f a_f(t)\varphi_f(\mathbf{x}),\\ \psi^+(\mathbf{x}, t)&=\sum_f a_f^+(t)\overset{*}{\varphi}_f(\mathbf{x}),\end{aligned}\right\} \quad (2,12)$$

a_f, a_f^+ — операторы уничтожения или порождения частиц (ферми или бозе), $\varphi_f(\mathbf{x})$ — полная, ортонормированная в некотором объеме V, система одночастичных функций, например $\varphi_f(\mathbf{x})=V^{-\frac{1}{2}}e^{i(f\mathbf{x})}$ для частиц без спина, f — импульс, для частиц со спином $f=(\mathbf{f}, \sigma)$ — совокупность импульса и

спина. Хронологическое или T-произведение n операторов $A_1(x_1) \ldots A_n(x_n)$ определяется как обычное их произведение в хронологическом порядке, умноженное на $\eta = (-1)^P$, где P — четность перестановки ферми-операторов при переходе от порядка 1, 2, ..., n к хронологическому порядку

$$T(A_1(x_1), \ldots, A_n(x_n)) = \eta A_{j_1}(x_{j_1}), \ldots, A_{j_n}(x_{j_n}) \qquad (2,13)$$
$$t_{j_1} > t_{j_2} > \ldots > t_{j_n}.$$

$x_j = (\mathbf{x}_j, t_j)$ — пространственно-временная точка.

Многовременные причинные функции Грина типа (2,11), когда усреднение ведется по «вакууму», хорошо известны в квантовой теории поля.

Заметим, что координаты и время входят в многовременные функции Грина симметрично. Для статистической механики это не существенно. Здесь удобнее применение двухвременных функций Грина (2,1), поскольку для них можно использовать спектральные разложения, которые сильно облегчают решение уравнений для функций Грина. С другой стороны двухвременные функции Грина содержат достаточно полную информацию о свойствах системы из многих частиц, так что в статистической механике для большого числа задач можно обойтись применением двухвременных функций Грина. Из двухвременных функций Грина в статистической механике более удобно использование запаздывающей и опережающей функций Грина G_r и G_a [19]. Как следует из определения (2,8б, в), $G_r(t-t')$ равна нулю при $t < t'$, а $G_a(t-t')$ при $t > t'$. Удобство функций G_r и G_a, как будет видно из дальнейшего, связано с тем, что они допускают аналитическое продолжение в комплексную плоскость (§ 3).

2.2 Уравнения для функций Грина

Получим систему уравнений функций Грина (2,1). Операторы $A(t)$ и $B(t)$ удовлетворяют уравнениям движения вида

$$i\frac{dA}{dt} = AH - HA. \qquad (2,14)$$

Правую часть уравнения (2,14) можно раскрыть с помощью явного вида для гамильтониана и перестановочных соотношений для операторов. Дифференцируя функции Грина (2,1а, б, в) по t, получим уравнение

$$i\frac{dG}{dt} = i\frac{d}{dt} \ll A; B \gg = \frac{d\theta(t-t')}{dt}\langle[A(t), B(t')]\rangle + \ll i\frac{dA(t)}{dt}; B(t') \gg, \qquad (2,15)$$

одинаковое для всех трех функций Грина G_c, G_r, G_a, так как $\frac{d}{dt}\theta(-t) = -\frac{d}{dt}\theta(t)$; поэтому мы пишем просто G и «...» без индексов. Учитывая далее связь разрывной функции $\theta(t)$ с δ-функцией от t

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{t} \delta(t)\,dt \qquad (2,16)$$

и уравнения движения для оператора $A(t)$ (2,14), запишем уравнение для функции Грина G в виде

$$i\frac{dG}{dt} = \delta(t-t')\langle[A(t), B(t)]\rangle + \ll\{A(t)H(t) - H(t)A(t)\}; B(t')\gg. \qquad (2,17)$$

В правую часть уравнений (2,17) входят двухвременные функции Грина, вообще говоря, более высокого порядка, чем исходная. Для них можно также составить уравнения типа (2,17) и получить цепочку

зацепляющихся уравнений для функций Грина. Ниже, в §§ 6—8, мы рассмотрим конкретные примеры таких цепочек.

Цепочки уравнений (2,17) представляют собой просто уравнения движения для функций Грина. Их нужно еще дополнить граничными условиями, что будет сделано ниже с помощью спектральных теорем.

Заметим, что можно получить и другие цепочки для функций Грина, например, швингеровского типа [6], для которых существенно применение многовременных функций Грина. Эти цепочки содержат величины типа вершинных частей, зависящие от трех временных аргументов, для которых пока еще не установлено спектральных теорем. В настоящем обзоре мы будем пользоваться лишь цепочками уравнений типа (2,17), поскольку в них мы не выходим за пределы двухвременных функций Грина, а для последних имеются спектральные теоремы, которые облегчают формулировку граничных условий.

Уравнения (2,17) точные, поэтому решение этой цепочки уравнений в общей постановке задачи чрезвычайно сложно. Иногда, с помощью какого-либо приближенного приема цепочку уравнений (2,17) удается расцепить, т. е. превратить в конечную систему уравнений, и решить. В настоящее время не имеется общих рецептов для таких расцеплений. Лишь в некоторых отдельных случаях модельных гамильтонианов оказывается возможным произвести расцепление цепочки уравнений асимптотически точно при $V \to \infty$ (см. § 6).

2.3. Временные корреляционные функции

В статистической механике важное значение имеют средние по статистическому ансамблю от произведения операторов в гейзенберговском представлении типа

$$\mathscr{F}_{BA}(t,\ t') = \langle B(t')\,A(t)\rangle;\quad \mathscr{F}_{AB}(t,\ t') = \langle A(t)\,B(t')\rangle \tag{2,18}$$

(усреднение по большому каноническому ансамблю Гиббса (2,2)), которые будем называть временными корреляционными функциями. Действительно, при несовпадающих временах ($t \neq t'$) они дают временные корреляционные функции, имеющие существенное значение для кинетических процессов (см. § 4). Функции $\mathscr{F}_{BA}$ и $\mathscr{F}_{AB}$, так же как и функции Грина, в случае статистического равновесия зависят лишь от $t - t'$ (см. (2,9))

$$\mathscr{F}_{BA}(t,\ t') = \mathscr{F}_{BA}(t-t');\quad \mathscr{F}_{AB}(t,\ t') = \mathscr{F}_{AB}(t-t'). \tag{2,19}$$

В отличие от функций Грина (2,8) временные корреляционные функции (2,18) не содержат разрывного множителя $\theta(t-t')$ и определены также и для совпадающих времен $t = t'$. При этом они дают средние значения от произведений операторов

$$\left.\begin{aligned} \mathscr{F}_{BA}(0) &= \langle B(t)\,A(t)\rangle = \langle B(0)\,A(0)\rangle,\\ \mathscr{F}_{AB}(0) &= \langle A(t)\,B(t)\rangle = \langle A(0)\,B(0)\rangle, \end{aligned}\right\} \tag{2,20}$$

т. е. обыкновенные корреляционные функции или функции распределения статистической механики, которые позволяют вычислять средние значения динамических величин.

Например, для системы взаимодействующих ферми-(или бозе-)частиц в случае парных сил гамильтониан имеет вид

$$H = \sum_{p} \frac{p^2}{2m} a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_{p_1 p_2 p_1' p_2'} \mathscr{V}(p_1 p_2;\ p_2' p_1')\, a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p_2'} a_{p_1'} \tag{2,21}$$

$$(p_1 + p_2 = p_1' + p_2'),$$

где a_p, a_p^+ — ферми-(или бозе-) операторы, $\frac{p^2}{2m}$ — кинетическая энергия частиц, $\mathscr{V}(p_1p_2;\ p_2'p_1')$ — матричные элементы энергии взаимодействия. Среднее значение энергии найдем, усредняя (2,21) по статистическому ансамблю (2,2)

$$\langle H\rangle = \sum_p \frac{p^2}{2m}\langle a_p^+ a_p\rangle + \frac{1}{2V}\sum_{p_1p_2p_1'p_2'} \mathscr{V}(p_1p_2;\ p_2'p_1')\langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p_2'} a_{p_1'}\rangle). \quad (2,22)$$

$$(p_1 + p_2 = p_1' + p_2').$$

Таким образом, средняя энергия выражается через $\mathscr{F}_{pp}$ и $\mathscr{F}_{p_1p_2;\,p_2'p_1'}$, одночастичную и двухчастичную функции распределения

$$\left.\begin{aligned} \mathscr{F}_{pp} &= \langle a_p^+ a_p\rangle, \\ \mathscr{F}_{p_1p_2;\,p_2'p_1'} &= \langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p_2'} a_{p_1'}\rangle, \end{aligned}\right\} \quad (2,23)$$

хорошо известные в статистической физике (см., например, [21], [22]). Функция $\mathscr{F}_{pp}$ дает истинное распределение частиц по импульсам, а $\mathscr{F}_{p_1p_2;\,p_2'p_1'}$ описывает корреляцию между двумя частицами. Знание одночастичной функции распределения позволяет вообще вычислять средние значения динамических величин аддитивного типа, парной функции распределения — величины парного типа и т. д.

Временные корреляционные функции (2,18) удовлетворяют уравнениям

$$\left.\begin{aligned} i\frac{d}{dt}\mathscr{F}_{BA} &= \langle B(t')\{A(t)H(t) - H(t)A(t)\}\rangle, \\ i\frac{d}{dt}\mathscr{F}_{AB} &= \langle\{A(t)H(t) - H(t)A(t)\}B(t')\rangle, \end{aligned}\right\} \quad (2,24)$$

которые получаются дифференцированием (2,18) по t с учетом уравнений движения для операторов. Заметим, что поскольку (2,18) не имеют разрыва при $t = t'$, уравнения (2,24) не имеют сингулярного члена $\delta(t - t')$ как в уравнениях для функций Грина (2,17). Остальные члены в уравнениях (2,17) и (2,24) построены по одному типу, лишь с заменой операции статистического усреднения $\langle\ldots\rangle$ на операцию $\langle\langle\ldots\rangle\rangle_{c,\,r,\,a}$ (см.(2,1)).

Корреляционные функции можно вычислить как непосредственной интеграцией уравнений (2,24), к которым нужно добавить еще граничные условия, так и косвенным путем, вычисляя сначала из уравнений (2,17) функции Грина $\langle\langle\ldots\rangle\rangle_{r,\,a}$ (или $\langle\langle\ldots\rangle\rangle_c$). Второй путь, которому мы будем следовать, значительно проще, так как при этом легче удовлетворить граничным условиям с помощью спектральных теорем (см. § 3).

§ 3. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

При решении уравнений для функций Грина важно иметь для них спектральные представления, которые дополняют систему уравнений необходимыми граничными условиями. В настоящем параграфе мы получим эти соотношения для функций Грина (2,1а, б, в) и соответствующих корреляционных функций (2,18).

3.1 Спектральные представления для временных корреляционных функций [10]

Получим сначала спектральные представления для временных корреляционных функций

$$\mathscr{F}_{BA}(t - t') = \langle B(t')A(t)\rangle, \quad \mathscr{F}_{AB}(t - t') = \langle A(t)B(t')\rangle. \quad (3,1)$$

Пусть C_ν и E_ν — собственные функции и собственные значения гамильтониана $\mathscr{H}$ ($\mathscr{H} = H - \mu N$)

$$\mathscr{H} C_\nu = E_\nu C_\nu. \tag{3,2}$$

Запишем в явном виде операцию статистического усреднения в определении временных корреляционных функций (3,1)

$$\langle B(t') A(t)\rangle = Q^{-1} \sum_\nu (C_\nu^* B(t') A(t) C_\nu) e^{-\frac{E_\nu}{\theta}}. \tag{3,3}$$

Воспользуемся обычным приемом теории дисперсионных соотношений, основанным на полноте системы функций C_ν и запишем выражение (3,3) в виде

$$\langle B(t') A(t)\rangle = Q^{-1} \sum_{\nu,\mu} (C_\nu^* B(t') C_\mu)(C_\mu^* A(t) C_\nu) e^{-\frac{E_\nu}{\theta}} =$$

$$= Q^{-1} \sum_{\nu,\mu} (C_\nu^* B(0) C_\mu)(C_\mu^* A(0) C_\nu) e^{-\frac{E_\nu}{\theta}} e^{-i(E_\nu - E_\mu)(t-t')}, \tag{3,4}$$

так как

$$e^{-i\mathscr{H}t} C_\nu = e^{-iE_\nu t} C_\nu, \quad C_\mu^* e^{i\mathscr{H}t} = C_\mu^* e^{iE_\mu t}. \tag{3,5}$$

С другой стороны,

$$\langle A(t) B(t')\rangle = Q^{-1} \sum_{\nu,\mu} (C_\nu^* A(0) C_\mu)(C_\mu^* B(0) C_\nu) e^{-\frac{E_\nu}{\theta}} e^{-i(E_\nu - E_\mu)(t'-t)}, \tag{3,6}$$

Заменяя в последнем равенстве индексы суммирования μ и ν и сравнивая (3,5) и (3,6), замечаем, что их можно представить в виде[10]

$$\mathscr{F}_{BA}(t-t') = \langle B(t') A(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \tag{3,7а}$$

$$\mathscr{F}_{AB}(t-t') = \langle A(t) B(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) e^{\frac{\omega}{\theta}} e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \tag{3,7б}$$

где введено обозначение

$$J(\omega) = Q^{-1} \sum_{\nu,\mu} (C_\nu^* A(0) C_\mu)(C_\mu^* B(0) C_\nu) e^{-\frac{E_\nu}{\theta}} \delta(E_\mu - E_\nu - \omega). \tag{3,8}$$

Соотношения (3,7) есть искомые спектральные представления для временных корреляционных функций, где $J(\omega)$ — спектральная интенсивность функции $\mathscr{F}_{BA}(t)$.

Для получения соотношений (3,7) можно было бы и не переходить к собственным функциям оператора $\mathscr{H}$. Для этого достаточно заметить, что $\mathscr{F}(t-t')$ зависит лишь от разности $t-t'$ из-за перестановочности операторов под знаком шпура; таким образом (3,8) есть просто определение фурье-компоненты. Соотношение (3,7б) можно получить из (3,7а) заменой $t-t' \to t-t'+\frac{i}{\theta}$, так как

$$\left\langle B(0) A\left(t + \frac{i}{\theta}\right)\right\rangle = \langle A(t) B(0)\rangle, \tag{3,9}$$

в чем легко убедиться непосредственной проверкой.

3.2. Спектральные представления для запаздывающей и опережающей функций Грина [10, 19]

Рассмотрим теперь спектральные представления для запаздывающей и опережающей функций Грина $G_r(t)$, $G_a(t)$ (2,1б, в). Их легко получить с помощью спектральных представлений (3,7а, б) для временных корреляционных функций. Действительно, пусть $G_r(E)$ есть фурье-компонента функции Грина $G_r(t-t')$

$$G_r(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(E)\, e^{-iE(t-t')}\, dE, \tag{3,10а}$$

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(t)\, e^{iEt}\, dt. \tag{3,10б}$$

(Для фурье-компонент функций Грина используем те же обозначения, как и для самих функций Грина.) Подставляя в (3,10б) $G_r(t)$ в виде (2,8б), получим

$$G_r(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')}\, \theta(t-t') \{\langle A(t) B(t')\rangle - \eta \langle B(t') A(t)\rangle\}. \tag{3,11}$$

Здесь под интегралом стоят временные корреляционные функции (3,1). Используя для них спектральное представление (3,7а, б), будем иметь

$$G_r(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, J(\omega) \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta\right) \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)t}\, \theta(t), \tag{3,12}$$

$$(\eta = \pm 1).$$

Разрывную функцию $\theta(t)$ можно представить в виде

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon t}\, \delta(t)\, dt \quad \varepsilon \to 0 \quad (\varepsilon > 0) \tag{3,13}$$

или, поскольку

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt}\, dx, \tag{3,14}$$

в интегральной форме

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x + i\varepsilon}\, dx. \tag{3,15}$$

Легко проверить, что так определенная функция действительно обладает свойствами разрывной θ функции. Будем рассматривать x как комплексную переменную и считать, что интеграл (3,15) берется по контуру, изображенному на рис.1 стр. 80 Подынтегральное выражение имеет полюс в нижней полуплоскости при $x = -i\varepsilon$. При $t > 0$ замыкание контура нужно производить в нижней полуплоскости и интеграл (3,15) равен единице. При $t > 0$ нужно замыкать контур в верхней полуплоскости и интеграл (3,15) равен нулю.

С использованием (3,15), (3,14) получим

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(E-\omega)t}\, \theta(t) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon}. \tag{3,16}$$

Следовательно, фурье-компонента $G_r(E)$ функции Грина $G_r(t)$ равна

$$G_r(E)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega+i\varepsilon}. \tag{3,17}$$

Повторяя те же вычисления для фурье-компоненты $G_a(E)$ функции Грина $G_a(t)$, получим

$$G_a(E)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega-i\varepsilon}. \tag{3,18}$$

Формулы (3,17) и (3,18) можно записать в виде одной формулы

$$G_{r,a}(E)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega\pm i\varepsilon} \tag{3,19}$$

(индексу r соответствует $+$, индексу a соответствует $-$).

Пока мы рассматривали E как вещественную величину. Функцию (3,19) можно аналитически продолжить в комплексную плоскость E. Действительно, считая, что E комплексно, имеем[19]

$$\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)J(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega}=\begin{cases} G_r(E) & \operatorname{Im}E>0\\ G_a(E) & \operatorname{Im}E<0.\end{cases} \tag{3,20}$$

Поэтому функцию $G_{r,a}$ можно рассматривать как единую аналитическую функцию в комплексной плоскости, имеющую особенности на действи-

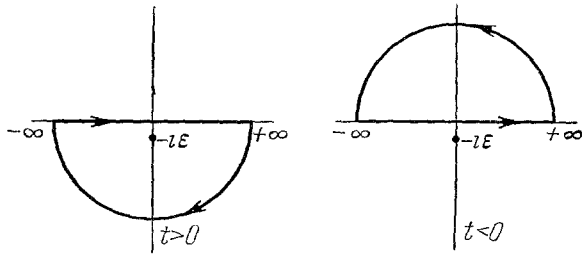

Рис. 1.

тельной оси. Индексы r, a мы будем далее опускать и писать просто $G(E)$, считая E комплексным.

Аналитичность функции $G(E)$ следует из теоремы, доказанной Н. Н. Боголюбовым и А. С. Парасюком в теории дисперсионных соотношений[23]. Рассмотрим сначала аналитические свойства функции $G_r(E)$; согласно (3,10б) имеем

$$G_r(E)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}G_r(t)\,e^{iEt}\,dt, \tag{3,21}$$

причем

$$G_r(t)=0 \quad \text{при} \quad t<0. \tag{3,22}$$

Покажем, что функция $G_r(E)$ может быть аналитически продолжена в области комплексных E. Пусть E имеет мнимую часть, отличную от нуля

$$E=\operatorname{Re}E+i\operatorname{Im}E=\alpha+i\nu, \quad \gamma>0.$$

Тогда будем иметь

$$G_r(\alpha+i\gamma)=\int_0^\infty G_r(t)\,e^{i\alpha t}e^{-\gamma t}\,dt,\quad \gamma>0. \tag{3,23}$$

Множитель $\exp(-\gamma t)$ играет роль обрезающего фактора, который обеспечивает сходимость интеграла (3,21) и его производных по E при достаточно общих предположениях о функции $G_r(t)$ *). Следовательно, функцию $G_r(E)$ можно аналитически продолжить в верхнюю полуплоскость. Аналогично можно показать, что функцию $G_a(E)$ можно аналитически продолжить в нижнюю полуплоскость

$$E=\alpha+i\gamma,\quad \gamma<0.$$

Если вдоль действительной оси совершить разрез, то функцию

$$G(E)=\begin{cases} G_r(E) & \operatorname{Im}E>0\\ G_a(E) & \operatorname{Im}E<0\end{cases} \tag{3,24}$$

можно рассматривать как единую аналитическую функцию, состоящую из двух ветвей, одна из которых определена в верхней, а другая в нижней полуплоскости комплексных значений E.

Если известна функция $G(E)$, можно найти и спектральную интенсивность $J(\omega)$ (3,7а) по соотношению

$$G(\omega+i\varepsilon)-G(\omega-i\varepsilon)=-i\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)J(\omega) \tag{3,25}$$

(ω — вещественна). Действительно, составляя разность выражений (3,20)

$$G(\omega+i\varepsilon)-G(\omega-i\varepsilon)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left(e^{\frac{E}{\theta}}-\eta\right)J(E)\left\{\frac{1}{\omega-E+i\varepsilon}-\frac{1}{\omega-E-i\varepsilon}\right\}dE \tag{3,26}$$

и воспользовавшись представлением δ-функции

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi i}\left\{\frac{1}{x-i\varepsilon}-\frac{1}{x+i\varepsilon}\right\}, \tag{3,27}$$

приходим к выражению (3,25).

Таким образом, если нам удалось каким-либо способом расцепить цепочку уравнений для функций Грина (2,17) и найти функцию Грина $G(E)$, мы можем построить по ней спектральную интенсивность $J(\omega)$ (3,7а) и найти выражения для временных корреляционных функций (3,7а, в).

Например,

$$\mathscr{F}_{BA}(t-t')=\langle B(t')A(t)\rangle=i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{G(\omega+i\varepsilon)-G(\omega-i\varepsilon)}{e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta}e^{-i\omega(t-t')}\,d\omega. \tag{3,28}$$

Далее мы покажем на конкретных примерах, как иногда удается выполнить эту программу.

Приведем еще некоторые простые соотношения для функций Грина. Воспользуемся в формулах (3,17), (3,18) символическим тождеством:

$$\frac{1}{E-\omega\pm i\varepsilon}=P\frac{1}{E-\omega}\mp i\pi\delta(E-\omega), \tag{3,29}$$

*) Для справедливости теоремы Боголюбова—Парасюка достаточно, чтобы $G_r(t)$ была обобщенной функцией в смысле Соболева—Шварца [23].

где $\varepsilon \to 0$, $\varepsilon > 0$, P означает интеграл в смысле главного значения. Здесь $E - \omega$ рассматривается как вещественная величина. Тогда получим*)

$$\left.\begin{aligned} G_r(E) &= \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E-\omega} - \frac{i}{2}(e^{\frac{E}{\theta}} - \eta) J(E), \\ G_a(E) &= \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) J(\omega) \frac{d\omega}{E-\omega} + \frac{i}{2}(e^{\frac{E}{\theta}} - \eta) J(E), \end{aligned}\right\} \quad (3,30)$$

откуда следует связь между действительной и мнимой частями функций Грина

$$\left.\begin{aligned} \operatorname{Re} G_r(E) &= \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G_r(\omega)}{\omega - E} d\omega, \\ \operatorname{Re} G_a(E) &= -\frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G_a(\omega)}{\omega - E} d\omega. \end{aligned}\right\} \quad (3,31)$$

Соотношения (3,31) имеют вид дисперсионных соотношений. Аналогичные соотношения для G_c см. в следующем разделе.

3.3. Спектральные представления для причинных функций Грина[12]

Свойства запаздывающих и опережающих функций Грина, установленные в предыдущем разделе, достаточны для приложений, которые мы будем рассматривать во второй части обзора. В настоящем разделе мы для полноты рассмотрим спектральные представления для причинных функций Грина[12].

Рассмотрим фурье-компоненту $G_c(E)$ причинной функции Грина

$$G_c(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_c(t) e^{iEt} dt. \quad (3,32)$$

E действительно). С использованием (2,8а), (3,7а, б), (3,15) после интегрирования формулу (3,32) можно записать в виде

$$G_c(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) \left\{ \frac{e^{\frac{\omega}{\theta}}}{E - \omega + i\varepsilon} - \frac{\eta}{E - \omega - i\varepsilon} \right\} d\omega \quad (3,33)$$

или, применяя символическое тождество (3,29), в виде[12]

$$G_c(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta) J(\omega) \left\{ P \frac{1}{E-\omega} - i\pi \frac{e^{\frac{\omega}{\theta}} + \eta}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta} \delta(E - \omega) \right\} d\omega. \quad (3,34)$$

---

*) Соотношение (3,30) выражает хорошо известные свойства предельных значений интеграла типа Коши, установленные впервые Ю. В. Сохоцким в 1873 г. и затем К. Племелем в 1908 г. (см. М. А. Лаврентьев и Б. В. Шабат «Методы теории функций комплексного переменного», Гостехиздат, М., 1958).

Отделяя действительную и мнимую часть соотношения (3,34), получим

$$\left.\begin{aligned} \operatorname{Re} G_c(E) &= \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta\right) J(\omega) \frac{d\omega}{E-\omega}, \\ \operatorname{Im} G_c(E) &= -\frac{1}{2}\left(e^{\frac{E}{\theta}} + \eta\right) J(E), \end{aligned}\right\} \tag{3,35}$$

откуда следует соотношение между действительной и мнимой частью функции Грина $G_c(E)$, полученное для одночастичной функции Грина Л. Д. Ландау[12],

$$\operatorname{Re} G_c(E) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}{e^{\frac{\omega}{\theta}} + \eta} \frac{\operatorname{Im} G_c(\omega)}{\omega - E} d\omega. \tag{3,36}$$

(Соотношение (3,36) было применено к теории сверхпроводимости в работе[16].) В формулах (3,32)—(3,36) E действительно. Причинные функции Грина не могут быть аналитически продолжены в комплексную плоскость E, в этом состоит неудобство их применения, и далее мы не будем ими пользоваться.

§ 4. ФУНКЦИИ ГРИНА В ТЕОРИИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ[10]

Функции Грина применимы не только для случая статистического равновесия. Они являются удобным средством для изучения процессов, в которых отклонение от состояния статистического равновесия невелико. При этом оказывается возможным вычислять кинетические коэффициенты процессов через функции Грина, вычисленные по невозмущенному равновесному состоянию, не прибегая явно к составлению кинетического уравнения.

4.1. Реакция системы на внешнее возмущение

Рассмотрим реакцию квантово-механической системы с гамильтонианом H, не зависящим от времени, на включение внешнего возмущения H_t^1. Полный гамильтониан равен

$$H + H_t^1, \tag{4,1}$$

причем предполагаем, что при $t = -\infty$ внешнее возмущение отсутствует

$$H_{t=-\infty}^1 = 0.$$

Например, в случае адиабатического включения периодического возмущения имеем

$$H_t^1 = \sum_{\Omega} e^{\varepsilon t} e^{-i\Omega t} V_\Omega \quad (\varepsilon \to 0,\ \varepsilon > 0) \tag{4,2}$$

или в случае мгновенного включения возмущения

$$H_t^1 = \begin{cases} 0, & t < t_0, \\ \sum_{\Omega} e^{-i\Omega t} V_\Omega, & t > t_0, \end{cases} \tag{4,3}$$

где V_Ω — не зависящий явно от времени оператор. Пусть A — динамическая переменная, также явно не зависящая от времени. Рассмотрим влияние включения возмущения (4,2) или (4,3) на средние значения оператора A.

Среднее значение A равно

$$\overline{A}(t) = \mathrm{Sp}\,\{\varrho(t)\,A\}, \tag{4,4}$$

где $\varrho(t)$ — статистический оператор, удовлетворяющий уравнению движения

$$i\frac{d\varrho(t)}{dt} = [H + H_t^1,\ \varrho(t)] \tag{4,5}$$

и начальному условию

$$\varrho(t)\,|_{t=-\infty} = \varrho = Q^{-1}\,e^{-\frac{H}{\theta}} \qquad (Q = \mathrm{Sp}\,e^{-\frac{H}{\theta}}), \tag{4,5'}$$

которое означает, что при $t = -\infty$ система находилась в состоянии статистического равновесия.

Ищем решение уравнения (4,5) в виде

$$\varrho(t) = \varrho + \Delta\varrho. \tag{4,6}$$

Тогда, пренебрегая членами $H_t^1\,\Delta\varrho$, поскольку отклонение системы от состояния статистического равновесия предполагается малым, получим

$$i\frac{d}{dt}\,\Delta\varrho = [H,\ \Delta\varrho] + [H_t^1,\ \varrho], \tag{4,7}$$

причем

$$\Delta\varrho(t)\,|_{t=-\infty} = 0.$$

Процессы, для которых в уравнении (4,4) можно ограничиться линейными членами по возмущению, называются линейными диссипативными процессами. (Учет высших членов см. в работе [10].)

Для решения уравнения (4,7) введем оператор

$$\Delta\varrho_1 = e^{iHt}\Delta\varrho e^{-iHt} \tag{4,8}$$

и учитывая перестановочность ϱ и H, получим

$$i\frac{d}{dt}\,\Delta\varrho_1 = e^{iHt}[H_t^1,\ \varrho]\,e^{-iHt}, \tag{4,9}$$

$$\Delta\varrho_1(-\infty) = 0.$$

Откуда после интеграции найдем

$$\Delta\varrho(t) = \frac{1}{i}\int\limits_{-\infty}^{t} e^{iH(\tau-t)}\,[H_\tau^1,\ \varrho]\,e^{-iH(\tau-t)}\,d\tau. \tag{4,10}$$

Подставляя (4,6), (4,10) в (4,4), получим

$$\overline{A}(t) = \langle A\rangle + \frac{1}{i}\int\limits_{-\infty}^{t} \langle[A(t),\ H_\tau^1(\tau)]\rangle\,d\tau, \tag{4,11}$$

где

$$A(t) = e^{iHt}\,Ae^{-iHt},\quad H_t^1(t) = e^{iHt}\,H_t^1\,e^{-iHt} \tag{4,12}$$

— гейзенберговское представление для операторов A и H_t^1. С учетом (4,2) запишем (4,11) в виде *)

$$\overline{A(t)} = \langle A\rangle + \sum_{\Omega}\frac{1}{i}\int\limits_{-\infty}^{t} \langle[A(t),\ V_\Omega(\tau)]\rangle\,e^{-i\Omega\tau+\varepsilon\tau}\,d\tau. \tag{4,13}$$

---

*) Здесь и далее в этом параграфе усреднение—по каноническому ансамблю Гиббса, в отличие от (2,1), и операторы берутся в представлении Гейзенберга с гамильтонианом H а не $\mathscr{H} = H - \mu N$.

Вводя под знаком интеграла функцию $\theta(t-\tau)$ и распространяя пределы интегрирования до $\tau=\infty$, перепишем (4,13) с использованием определений (2,1б), (3,10б) в виде

$$\overline{A(t)}=\langle A\rangle+\sum_{\Omega} e^{-i\Omega t+\varepsilon t}\, 2\pi\, \langle\langle A \mid V_{\Omega}\rangle\rangle_{E=\Omega}^{\mathrm{ret}}, \tag{4,14}$$

где $\langle\langle A \mid V_{\Omega}\rangle\rangle_{E=\Omega}^{\mathrm{ret}}$ — фурье-компонента (при $E=\Omega$) запаздывающей функции Грина $\langle\langle A(t);\ V_{\Omega}(\tau)\rangle\rangle_{r}$, $(\eta=-1)$.

Следовательно, изменение среднего значения оператора при адиабатическом включении периодического возмущения выражается через фурье-компоненты запаздывающих функций Грина, связывающих оператор возмущения и наблюдаемую величину.

В случае мгновенного включения взаимодействия, подставляя (4,3) в (4,11), получим:

$$\overline{A(t)}=\langle A\rangle+\sum_{\Omega}\int_{t_0}^{\infty} \langle\langle A(t);\ V_{\Omega}(\tau)\rangle\rangle^{\mathrm{ret}} e^{-i\Omega\tau+\varepsilon\tau}\, d\tau, \tag{4,15}$$

т. е. реакция системы также выражается через запаздывающие функции Грина. Соотношения (4,13)—(4,14) хорошо известны в статистической механике необратимых процессов, где запаздывающие функции Грина называют обычно функциями последействия.

Представляет интерес частный случай, когда внешнее возмущение периодично по времени и содержит лишь одну гармонику частоты ω. Полагая в этом случае в (4,2) $\Omega=\pm\omega$, так как

$$H_t^1=-\mathscr{F}_0\cos\omega t e^{\varepsilon t} B, \tag{4,16}$$

где $\mathscr{F}_0$ — амплитуда периодической силы есть C-число, а B — операторная часть возмущения, из формулы (4,14) получим

$$\overline{A}(t)=\langle A\rangle-\mathscr{F}_0 e^{-i\omega t+\varepsilon t}\pi\,\langle\langle A \mid B\rangle\rangle_{E=\omega}^{\mathrm{ret}}-\mathscr{F}_0 e^{i\omega t+\varepsilon t}\pi\,\langle\langle A \mid B\rangle\rangle_{E=-\omega}^{\mathrm{ret}} \tag{4,17}$$

или, учитывая, что $\overline{A}(t)$ есть действительная величина

$$\overline{A}(t)=\langle A\rangle+\mathrm{Re}\,\{\chi(\omega)\,\mathscr{F}_0 e^{-i\omega t+\varepsilon t}\}, \tag{4,18}$$

где Re означает действительную часть выражения, $\chi(\omega)$ — комплексная проводимость (admittance), равная

$$\chi(\omega)=-2\pi\,\langle\langle A \mid B\rangle\rangle_{E=\omega}^{\mathrm{ret}}. \tag{4,19}$$

Соотношения (4,18), (4,19) проясняют физический смысл фурье-компонент запаздывающей функции Грина $\langle\langle A(t)B(\tau)\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}$ как комплексной проводимости, описывающей влияние периодического возмущения (4,16) на среднее значение величины A.

4.2. Тензор электропроводимости

Рассмотрим, в качестве примера, связь тензора электропроводимости с функциями Грина [10]. Пусть включается адиабатически постоянное в пространстве электрическое поле $\mathbf{E}(t)$, периодически меняющееся во времени с частотой ω

$$\mathbf{E}(t)=\mathbf{E}\cos\omega t.$$

Соответствующий оператор возмущения равен

$$H_t^1=-\sum e_j(\mathbf{E}\mathbf{x}_j)\cos\omega t e^{\varepsilon t} \tag{4,20}$$

(где e_j — заряд частицы, суммирование по всем координатам частиц $\mathbf{x}_j$). Под влиянием возмущения (4,20) в системе возникает электрический ток

$$j_\alpha(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle j_\alpha(t);\ H^1_\tau(\tau)\rangle\rangle\, d\tau, \tag{4,21}$$

где

$$\begin{aligned} H^1_\tau(\tau) &= H^1(\tau)\cos\omega\tau e^{\varepsilon\tau}, \\ H^1(t) &= -\sum_{j,\alpha} e_j E_\alpha x_{\alpha j}(\tau), \\ j_\alpha(t) &= \sum_j e_j \dot{x}_{\alpha j}(t), \end{aligned} \tag{4,22}$$

j_α — оператор плотности тока, если объем системы принят за единицу. Запишем соотношение (4.21), интегрируя его по частям, в виде

$$j_\alpha(t) = -\operatorname{Re}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle j_\alpha(t); \dot{H}^1(\tau)\rangle\rangle \frac{e^{i\omega t+\varepsilon\tau}d\tau}{i\omega+\varepsilon} + \langle[j_\alpha(0), H^1(0)]\rangle e^{i\omega t+\varepsilon t}\frac{1}{\omega-i\varepsilon}\right\}. \tag{4,23}$$

Откуда, замечая, что

$$\dot{H}^1(\tau) = -(E\mathbf{j}(\tau)), \quad [\dot{x}_{\alpha j_1}, x_{\beta j_2}] = -\frac{i}{m}\delta_{\alpha\beta}\delta_{j_1 j_2} \quad (\hbar = 1),$$

получим

$$j_\alpha(t) = \operatorname{Re}\{\sigma_{\alpha\beta}(\omega) E_\beta e^{i\omega t+\varepsilon t}\}, \tag{4,24}$$

где

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{ie^2 n}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} + \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle j_\alpha(0); j_\beta(\tau)\rangle\rangle \frac{e^{i\omega\tau+\varepsilon\tau}}{i\omega+\varepsilon} d\tau \tag{4,25}$$

есть тензор электропроводимости, n — число электронов в единице объема. Первый член в (4,25) соответствует электропроводности системы свободных зарядов и не связан со взаимодействием между частицами. При $\omega \to \infty$ второй член убывает быстрее, чем первый $\left(\lim\limits_{\omega\to\infty} \operatorname{Im}\omega\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{e^2 n}{m}\delta_{\alpha\beta}\right)$, и система ведет себя как совокупность свободных зарядов.

Соотношение (4,25) можно записать, используя (3,7) и выполняя интегрирование по τ, в другой, эквивалентной форме

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{ie^2 n}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} + \frac{e^{-\frac{\omega}{\theta}}-1}{\omega}\int_{-\infty}^{\infty} \langle j_\alpha(0)\, j_\beta(t)\rangle e^{-i\omega t} dt. \tag{4,26}$$

Это есть известная теорема Найквиста [24], обобщенная для квантового случая Велтоном и Келленом [9], которая связывает электропроводность с флуктуациями токов. Ее записывают обычно в несколько иной форме [10]

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{ie^2 n}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{\omega}\operatorname{th}\frac{\omega}{2\theta}\int_{-\infty}^{\infty} \langle\{j_\alpha(0)\, j_\beta(t)\}\rangle e^{-i\omega t} dt, \tag{4,27}$$

где

$$\langle\{A(t)B(t')\}\rangle = \frac{1}{2}\langle(A(t)B(t') + B(t')A(t))\rangle$$

— симметризованные временные корреляционные функции. С помощью соотношения (4,27) можно вычислить электропроводность, не прибегая к составлению кинетического уравнения [25].

Соотношения (4,25) — (4,27) замечательны тем, что они связывают характеристику неравновесного состояния — электропроводность с корреляционной функцией токов в состоянии статистического равновесия. Такого типа соотношение было впервые получено Кирквудом для коэффициента внутреннего трения [26]. Они имеют место и для других кинетических коэффициентов, например, коэффициентов диффузии и термодиффузии, тензора магнитной восприимчивости и т. д. Мы не будем останавливаться на этих вопросах, отсылая читателя к цитированным работам [10, 18, 27–29]. О применении функций Грина в теории необратимых процессов см. особенно [10, 18], где более подробно рассмотрены флуктуационно диссипативные теоремы и дисперсионные соотношения для кинетических коэффициентов.

§ 5. ИДЕАЛЬНЫЕ КВАНТОВЫЕ ГАЗЫ

В качестве простой иллюстрации метода рассмотрим функции Грина для идеальных квантовых газов. Гамильтониан идеального ферми- (или бозе-) газа имеет вид

$$\mathscr{H} = \sum_f T_f a_f^+ a_f, \tag{5,1}$$

где $f = (k, \sigma)$, σ — спиновый индекс, k — импульс (для бозе-газа $\sigma = 0$), $T_f = \frac{k^2}{2m} - \mu$, μ — химический потенциал, a_f, a_f^+ — операторы, удовлетворяющие перестановочным соотношениям статистики Ферми и Бозе.

$$\left.\begin{aligned} a_f a_{f'}^+ - \varepsilon a_{f'}^+ a_f &= \delta_{ff'}, \\ a_f a_{f'} - \varepsilon a_{f'} a_f = a_f^+ a_{f'}^+ - \varepsilon a_{f'}^+ a_f^+ &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{5,2}$$

(для статистики Ферми $\eta = -1$, а для Бозе $\varepsilon = +1$). Квантовые уравнения движения (2,14) для операторов весьма просты

$$i\frac{da_f}{dt} = T_f a_f; \quad i\frac{da_f^+}{dt} = -T_f a_f^+. \tag{5,3}$$

Введем функцию Грина ($\eta = \varepsilon$)

$$G_f(t-t') = \langle\langle a_f(t); \quad a_f^+(t')\rangle\rangle, \tag{5,4}$$

соответствующую выбору в формулах (2,1б, в)

$$A(t) = a_f(t), \quad B(t') = a_f^+(t'), \tag{5,5}$$

и составим для нее уравнение движения (2,15)

$$i\frac{dG_f}{dt} = \delta(t-t') + T_f G_f. \tag{5,6}$$

Уравнение (5,6) легко решить.

Переходя к фурье-компонентам функций Грина

$$G_f(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_f(E)\, e^{-iE(t-t')} dE$$

и используя представление δ-функции

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')} dE, \tag{5,7}$$

получим

$$(E-T_f)\,G_f(E)=\frac{1}{2\pi}. \tag{5,8}$$

Следовательно, функция Грина $G_f(E)$ равна

$$G_f(E)=\frac{1}{2\pi}\,\frac{1}{E-T_f}. \tag{5,9}$$

К решению (5,9) можно было бы добавить еще сингулярную часть вида $\delta(E-T_f)$ с произвольным коэффициентом. Однако полученная таким образом функция не удовлетворяла бы аналитическим свойствам запаздывающих (или опережающих) функции Грина (см. раздел 3.2), поэтому коэффициент при δ-функции нужно положить равным нулю; следовательно, (5,9) дает требуемое решение. Для причинных функций Грина нужно учитывать сингулярную добавку к решению (5,9) так, чтобы функции Грина обладали необходимыми аналитическими свойствами (см. раздел 3,3). Таким образом, из (5,9) видно, что функции Грина имеют полюс при $E=T_f$, следовательно, энергия элементарных возбуждений $E(f)=T_f$ соответствует полюсу функции Грина. Спектральную интенсивность $J(\omega)$ соответствующей корреляционной функции

$$\mathscr{F}_f(t-t')=\langle a_f^+(t')\,a_f(t)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}J_f(\omega)\,e^{-\omega(t-t')}d\omega \tag{5,10}$$

найдем, воспользовавшись соотношением (3.25)

$$G_f(\omega+i\varepsilon)-G_f(\omega-i\varepsilon)=-i\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)J_f(\omega)$$

и представлением δ-функции (3,27)

$$J_f(\omega)=\frac{\delta(\omega-T_f)}{e^{\frac{T_f}{\theta}}-\eta}. \tag{5,11}$$

Как видим, для идеальных газов спектральная интенсивность $J(\omega)$ имеет δ-образный характер. Для $\mathscr{F}_f(t-t')$ получим

$$\mathscr{F}_f(t-t')=\langle a_f^+(t')\,a_f(t)\rangle=\frac{e^{-iT_f(t-t')}}{e^{\frac{T_f}{\theta}}-\eta}. \tag{5,12}$$

Полагая в (5,12) $t=t'$, найдем средние числа заполнения

$$\bar{n}_f=\langle a_f^+a_f\rangle=\left\{e^{\frac{T_f}{\theta}}-\eta\right\}^{-1}. \tag{5,13}$$

Химический потенциал μ определим из условия

$$\sum_f\left\{e^{\frac{T_f}{\theta}}-\eta\right\}^{-1}=N. \tag{5,14}$$

Заметим, что при вычислении $\bar{n}_f$ нам не потребовалось вычислять статистическую сумму. Вместо этого мы решали уравнения для функции Грина и использовали спектральную теорему (3,25).

Приведенный пример носит чисто иллюстративный характер, для рассмотрения идеальных газов не требуется применения техники функций Грина. Мы привели этот пример лишь для того, чтобы для самого простого случая показать общую схему рассуждений, которая сохраняется и для других, уже не тривиальных примеров. Функции Грина идеального

газа легко вычислить и непосредственно, воспользовавшись определением (2,1) – (2,5) и перестановочными соотношениями для операторов (5,2) и тем, что для идеального газа

$$\left.\begin{aligned} a_f(t) &= e^{iHt} a_f e^{-iHt} = e^{-iT_f t} a_f, \\ a_f^+(t) &= e^{iHt} a_f^+ e^{-iHt} = e^{iT_f t} a_f^+. \end{aligned}\right\} \tag{5,15}$$

Тогда для функций Грина будем иметь

$$\left.\begin{aligned} G_f^c(t-t') &= \langle\langle a_f(t)\, a_f^+(t')\rangle\rangle_c = \\ &= -i\theta(t-t')\, e^{-iT_f(t-t')}(1+\eta\bar{n}_f) - i\eta\theta(t'-t)\, e^{-T_f(t-t')}\bar{n}_f, \\ G_f^r(t-t') &= \langle\langle a_f(t)\, a_f^+(t')\rangle\rangle_r = -i\theta(t-t')\, e^{-iT_f(t-t')}, \\ G_f^a(t-t') &= \langle\langle a_f(t)\, a_f^+(t')\rangle\rangle_a = i\theta(t'-t)\, e^{-iT_f(t-t')} \end{aligned}\right\} \tag{5,16}$$

и для соответствующих фурье-компонент, с использованием (3,15), получим

$$\left.\begin{aligned} G_f^c(E) &= \frac{1}{2\pi}\left\{\frac{1+\eta\bar{n}_f}{E-T_f+i\varepsilon} - \frac{\eta\bar{n}_f}{E-T_f-i\varepsilon}\right\}, \\ G_f^r(E) &= \frac{1}{2\pi}\frac{1}{E-T_f+i\varepsilon}, \\ G_f^a(E) &= \frac{1}{2\pi}\frac{1}{E-T_f-i\varepsilon}. \end{aligned}\right\} \tag{5,17}$$

Отметим, что для идеального газа запаздывающая и опережающая функции Грина (5, 17) не зависят от температуры.

В дальнейшем в настоящей работе мы будем иметь дело только с запаздывающими и опережающими функциями Грина (2,1б, в) и не будем это специально оговаривать.

§ 6. ПРИЛОЖЕНИЕ К ТЕОРИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

В работах [30–32] было показано, что теорию сверхпроводимости можно развивать, исходя из модельного гамильтониана Бардина—Купера—Шриффера, в котором взаимодействие электронов с фононами заменено прямым взаимодействием между ними и учитываются лишь взаимодействия пар электронов с противоположными направлениями импульсов и спинов. Эти взаимодействия, как было показано, являются основными, ответственными за явление сверхпроводимости. В работе [31], где теория сверхпроводимости развивалась, исходя из точного гамильтониана Фрелиха, в котором явно учитывается испускание и поглощение фононов решеткой, обоснована, в частности, возможность замены гамильтониана модельным и уточнен выбор его параметров. В настоящем параграфе мы рассмотрим применение запаздывающих и опережающих функций Грина к теории сверхпроводимости, основанной на модельном гамильтониане такого типа. (Причинные функции Грина применялись к теории сверхпроводимости в работах [16,34–35].)

Рассмотрение модельного гамильтониана представляет интерес потому, что он может быть решен асимптотически точно при $V \to \infty$ ($\frac{V}{N} = \text{const}$) (см. [32,63,65]). Поэтому не требуется делать каких-либо приближений при расцеплении цепочек для функций Грина, которое осуществляется асимптотически точно. Решение модельного примера может служить, кроме того, указанием на возможные аппроксимации при решении других, уже не модельных примеров.

6.1. Модельный гамильтониан

Будем исходить из модельного гамильтониана вида:

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + H_{\text{int}} = \sum_f T_f a_f^+ a_f - \frac{1}{2V} \sum_{f, f'} J(f, f')\, a_f^+ a_{-f}^+ a_{-f'} a_{f'}, \tag{6,1}$$

где $f = (k, \sigma)$, $-f = (-k, -\sigma)$, σ — спиновой индекс, принимающий два значения $+1/2$ и $-1/2$, k — импульс, $T_f = \frac{k^2}{2m} - \mu$, μ — химический потенциал, a_f, a_f^+ — операторы, удовлетворяющие перестановочным соотношениям статистики Ферми (5,2), $J(f, f')$ — действительная функция, обладающая свойствами

$$\left.\begin{aligned} &J(-f, f') = -J(f, f'), \quad J(f, -f') = -J(f, f'), \\ &J(f, f') = J(f', f). \end{aligned}\right\} \tag{6,2}$$

В случае модели Бардина надо положить

$$\left.\begin{aligned} &J\left(k, \frac{1}{2}; k', \frac{1}{2}\right) = J\left(k, -\frac{1}{2}; k', -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} J(k, k') > 0, \\ &J\left(-k, -\frac{1}{2}; k', \frac{1}{2}\right) = J\left(k, \frac{1}{2}; -k', -\frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2} J(k, -k'), \\ &(J(k, k') = J(-k, -k')) \end{aligned}\right\} \tag{6,3}$$

или

$$J(f, f') = \frac{1}{2} \{J(k, k')\, \delta_{\sigma-\sigma'} - J(k, -k')\, \delta_{\sigma+\sigma'}\}. \tag{6,4}$$

Гамильтониан (6,1) для случая (6,3) принимает вид

$$\mathscr{H} = \sum_{k, \sigma} \left(\frac{k^2}{2m} - \mu\right) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \frac{1}{V} \sum_{k, k'} J(k, k')\, a^+_{k, \frac{1}{2}} a^+_{-k, -\frac{1}{2}} a_{-k', -\frac{1}{2}} a_{k', \frac{1}{2}}. \tag{6,5}$$

Отметим интересное свойство модельного гамильтониана (6,1). Если выбрать в качестве гамильтониана нулевого приближения гамильтониан невзаимодействующих частиц $\mathscr{H}_0$, как это делается в обычной теории возмущений, то оператор H_{int} дает при $V \to \infty$ асимптотически малый вклад в энергию системы и другие термодинамические функции *во всех приближениях* статистической теории возмущений. Например, в первом приближении получим выражение

$$\langle H_{\text{int}} \rangle = -\frac{1}{V} \sum_f J(f, f) \langle n_f \rangle^2,$$

конечное при $V \to \infty$. Легко видеть, что это свойство сохраняется и для высших приближений. Но, поскольку в процессе предельного перехода $V \to \infty$ отношение $\langle H \rangle$ к V должно стремиться к конечному пределу, оператор H_{int} дает асимптотически малый вклад во всех приближениях обычной теории возмущений. С другой стороны, как известно[30, 32], модельное взаимодействие оказывается существенным и дает конечный вклад в термодинамические функции. Таким образом, гамильтониан (6,1) является примером такого взаимодействия, которое дает нуль (при $V \to \infty$) в каждом члене теории возмущений и приводит к конечному эффекту для всего ряда. Это связано, по-видимому, с тем, что эффект членов ряда теории возмущений начинает сказываться с больших $n \sim n_0$, где $n_0 \to \infty$ вместе с N (N — число частиц). При обычном рассмотрении эти члены считаются бесконечно малыми и не учитываются. Аналогичная ситуация имеет место в обычной теории конденсации, где необходимо учитывать группы из большого числа молекул[33].

6.2. Применение функций Грина

Рассмотрим теперь применение запаздывающих и опережающих функций Грина к гамильтониану (6,1). Составим сначала квантовые уравнения движения (2,15) для операторов a_f, a_f^+

$$\left.\begin{aligned} i\frac{da_f}{dt} &= T_f a_f - \frac{1}{V}\sum_{f'} J(f, f')\, a_{-f}^+ a_{-f'} a_{f'}, \\ i\frac{da_f^+}{dt} &= -T_f a_f^+ + \frac{1}{V}\sum_{f'} J(f, f')\, a_{f'}^+ a_{-f'}^+ a_f. \end{aligned}\right\} \qquad (6,6)$$

Введем функцию Грина

$$G_f(t-t') = \langle\langle a_f(t);\ a_f^+(t')\rangle\rangle \qquad (\eta = -1) \qquad (6,7)$$

и составим для нее уравнение движения (2,17)

$$i\frac{dG_f}{dt} = \delta(t-t') + T_f G_f - \frac{1}{V}\sum_{f'} J(f, f')\langle\langle a_{-f}^+ a_{-f'}, a_{f'};\ a_f^+(t')\rangle\rangle \qquad (6,8)$$

(аргумент t у операторов для краткости опускаем). В уравнение для G_f входит также двухвременная функция Грина $\Gamma_{ff'}$

$$\Gamma_{ff'}(t-t') = \langle\langle a_{-f}^+(t)\, a_{-f'}(t)\, a_{f'}(t);\ a_f^+(t')\rangle\rangle. \qquad (6,9)$$

Составим и для нее уравнение движения:

$$\begin{aligned} i\frac{d\Gamma_{ff'}}{dt} = {} & \delta(t-t')\, n_{-f}(\delta_{f-f'} - \delta_{f+f'}) + (2T_{f'} - T_f)\Gamma_{ff'} - \\ & - \frac{1}{V}\sum_g J(f, g)\langle\langle a_g^+ a_{-g}^+ a_{-f'} a_{f'} af';\ a_f^+(t')\rangle\rangle - \\ & - \frac{1}{V}\sum_g J(f', g)\langle\langle (1 - n_{-f'} - n_{f'})\, a_{-f}^+ a_{-g} a_g;\ a_f^+(t')\rangle\rangle - \\ & - \frac{1}{V}\sum_g J(f', g)\,\Gamma_{fg}(\delta_{f+f'} + \delta_{f-f'}). \end{aligned} \qquad (6,10)$$

Функция Грина (6,9) соответствует выбору в (2,1 б, в).

$$A = a_{-f}^+ a_{-f'} a_{f'}, \quad B = a_f^+. \qquad (6,11)$$

Заметим, что в уравнение (6,8) для G_f величина $\Gamma_{ff'}$ входит под знаком суммы по f' с множителем $\frac{1}{V}$. Следовательно, в уравнении (6,10) для $\Gamma_{ff'}$ можно с асимптотической точностью пренебречь членами $\delta_{f+f'}$, $\delta_{f-f'}$. По той же причине среднее от произведения операторов $n_{f'}$ и

$$\frac{1}{V}\sum_g J(f', g)\, a_{-f}^+ a_{-g} a_g a_f^+$$

во второй сумме уравнения (6,10) можно заменить, также с асимптотической точностью, на произведение их средних, принимая во внимание, что средние значения этих операторов представляют макроскопические величины, конечные при $V \to \infty$. Следовательно, можно положить *)

$$\langle\langle (1 - n_{-f'} - n_{f'})\, a_{-f}^+ a_{-g} a_g;\ a_f^+(t')\rangle\rangle = (1 - \bar{n}_{-f'} - \bar{n}_{f'})\langle\langle a_{-f}^+ a_{-g} a_g;\ a_f^+(t')\rangle\rangle.$$

---

*) То, что подобное расцепление действительно асимптотически точно при $V \to \infty$, показывает совпадение соответствующего решения с решением Бардина—Купера—Шриффера [30] (см. следующий раздел), для которого доказана асимптотическая точность решения в [32] с помощью теории возмущений и в [63,65] без использования теории возмущений. В работах [63, 65] было также показано, что можно удовлетворить всей цепочке уравнений для функций Грина, построенных на основе модельного гамильтониана.

Повторяя эти рассуждения и для первой суммы уравнения (6,10), запишем систему уравнений (6,8), (6,10) в виде

$$\left.\begin{aligned} i\frac{dG_f}{dt} &= \delta(t-t') + T_f G_f - \frac{1}{V}\sum_{f'} J(f, f')\Gamma_{ff'}, \\ i\frac{d\Gamma_{ff'}}{dt} &= (2T_{f'} - T_f)\Gamma_{ff'} - \\ &\quad - \frac{1}{V}\sum_g J(f, g)\langle a_g^+ a_{-g}^+ a_{-f'} a_{f'}\rangle G_f - \\ &\quad - \frac{1}{V}\sum_g J(f', g)(1 - \bar{n}_{-f'} - \bar{n}_{f'})\Gamma_{fg}. \end{aligned}\right\} \tag{6,12}$$

Переходя к фурье-компонентам функций Грина (3,9)

$$\left.\begin{aligned} G_f(t-t') &= \int_{-\infty}^{\infty} G_f(E)\, e^{-iE(t-t')}\, dE, \\ \Gamma_{ff'}(t-t') &= \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{ff'}(E)\, e^{-iE(t-t')}\, dE \end{aligned}\right\} \tag{6,13}$$

(для функций Грина и их фурье-компонент применяем одинаковые обозначения), можно записать систему уравнений для $G_f(E)$ и $\Gamma_{ff'}(E)$ в виде, уже не содержащем производных по времени:

$$EG_f = \frac{1}{2\pi} + T_f G_f - \frac{1}{V}\sum_{f'} J(f, f')\Gamma_{ff'},$$

$$E\Gamma_{ff'} = (2T_{f'} - T_f)\Gamma_{ff'} - \frac{1}{V}\sum_g J(f, g)\langle a_g^+ a_{-g}^+ a_{-f'} a_f\rangle G_f - \\ - \frac{1}{V}\sum_g J(f', g)(1 - \bar{n}_{-f'} - \bar{n}_{f'})\Gamma_{fg}. \tag{6,14}$$

Таким образом, мы получим систему интегральных уравнений для функций $G_f(E)$ и $\Gamma_{ff'}(E)$. Нетрудно заметить, что решение уравнения (6,14) можно найти в виде

$$\langle a_g^+ a_{-g}^+ a_{-f'} a_{f'}\rangle = A_g A_f, \qquad \Gamma_{ff'} = \Gamma_f A_{f'} \qquad (A_f^* = A_f). \tag{6,15}$$

Действительно, для G_f и Γ_f получаем уравнение (ср. [34])

$$\left.\begin{aligned} (E - T_f)G_f - L_f\Gamma_f &= \frac{1}{2\pi}, \\ (E + T_f)\Gamma_f - L_f G_f &= 0, \end{aligned}\right\} \tag{6,16}$$

где, кроме того, положили

$$2T_{f'} + \frac{1 - 2\bar{n}_{f'}}{A_{f'}} L_{f'} = 0 \tag{6,17}$$

и ввели обозначение

$$L_f = -\frac{1}{V}\sum_g J(f, q) A_g. \tag{6,18}$$

Разрешая систему уравнений (6,16), получим

$$G_f(E)=\frac{1}{2\pi}\frac{E+T_f}{E^2-T_f^2-L_f^2},$$
$$\Gamma_f(E)=\frac{1}{2\pi}\frac{L_f}{E^2-T_f^2-L_f^2}. \tag{6,19}$$

Полюса функций Грина (6,19) дают для спектра элементарных возбуждений системы выражение [30]

$$\omega_f=\sqrt{T_f^2+L_f^2}. \tag{6,20}$$

С учетом (6,20) функции Грина удобно записать в виде

$$G_f(E)=\frac{1}{4\pi}\left\{\left(1+\frac{T_f}{\omega_f}\right)\frac{1}{E-\omega_f}+\left(1-\frac{T_f}{\omega_f}\right)\frac{1}{E+\omega_f}\right\},$$
$$\Gamma_{ff'}(E)=\frac{1}{4\pi\omega_f}A_{f'}L_f\left\{\frac{1}{E-\omega_f}-\frac{1}{E+\omega_f}\right\}. \tag{6,21}$$

Легко вычислить спектральные интенсивности временных корреляционных функций $I_f(\omega)$

$$\langle a_f^+(t')\,a_f(t)\rangle=\int\limits_{-\infty}^{\infty}I_f(\omega)\,e^{-i\omega(t-t')}\,d\omega. \tag{6,22}$$

Функцию $I_f(\omega)$ найдем, воспользовавшись формулой (3,25), которая в нашем случае ($\eta=-1$) имеет вид

$$G_f(\omega+i\varepsilon)-G_f(\omega-i\varepsilon)=-i\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}+1\right)I_f(\omega),$$

и представлением δ-функции (3,27),

$$I_f(\omega)=\frac{1}{2}\left(1+\frac{T_f}{\omega_f}\right)\frac{\delta(\omega-\omega_f)}{1+e^{\frac{\omega_f}{\theta}}}+\frac{1}{2}\left(1-\frac{T_f}{\omega_f}\right)\frac{\delta(\omega+\omega_f)}{1+e^{-\frac{\omega_f}{\theta}}} \tag{6,23}$$

Из формулы (6,22), полагая в ней $t=t'$, получим уравнение для среднего числа заполнения $\bar{n}_f$

$$\bar{n}_f=\frac{1}{2}\left\{1-\frac{T_f}{\omega_f}\operatorname{th}\frac{\omega_f}{2\theta}\right\}. \tag{6,24}$$

Для временной корреляционной функции с учетом (6,15), (3,7а), (3,25), (3,27) получим спектральное разложение

$$\langle a_f^+(t')\,a_{-f}^+(t)\,a_{-f'}(t)\,a_{f'}(t)\rangle=A_{f'}A_f(t-t')=A_{f'}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\tilde{I}_f(\omega)\,e^{-i\omega(t-t')}\,d\omega, \tag{6,25}$$

где спектральная интенсивность $\tilde{I}_f(\omega)$ равна

$$\tilde{I}_f(\omega)=\frac{L_f}{2\omega_f}\left\{\frac{\delta(\omega-\omega_f)}{1+e^{\frac{\omega_f}{\theta}}}-\frac{\delta(\omega+\omega_f)}{1+e^{-\frac{\omega_f}{\theta}}}\right\}. \tag{6,26}$$

Полагая в формуле (6,25) $t=t'$, найдем величину A_f

$$A_f=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\tilde{I}_f(\omega)\,d\omega=-\frac{L_f}{2\omega_f}\operatorname{th}\frac{\omega_f}{2\theta}. \tag{6,27}$$

Легко проверить, что выражения (6,27), (6,24) удовлетворяют также соотношению (6,17), таким образом, сделанное допущение оказалось правильным. Для величины L_f, которая играет роль щели в спектре элементарных возбуждений, из (6,27), (6,18) получаем уравнение

$$L_f = \frac{1}{V} \sum_g J(f, g) \frac{L_g}{2\omega_g} \operatorname{th} \frac{\omega_g}{2\theta}. \tag{6,28}$$

Уравнение (6,28) имеет нетривиальное решение $L_f \neq 0$ при достаточно низких температурах θ для положительно определенного ядра $J(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (см. (6,3)), что соответствует преобладанию притяжения между электронами с противоположным направлением импульсов и спинов, которое возникает из-за обмена фононами над кулоновским отталкиванием. (Исследование влияния кулоновского взаимодействия см. [37].)

Решение уравнения (6,28) для случая, когда ядро интегрального уравнения факторизуется, см. в работе [30] и при более общих предположениях о ядре [36] (см. раздел 6.4).

Для средней энергии с помощью (6,15) получим

$$\langle H \rangle = \sum_f T_f \bar{n}_f - \frac{1}{2V} \sum_{ff'} J(f, f') A_f A_{f'} \tag{6,29}$$

или с использованием (6,27), (6,24)

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \sum T_f \left(1 - \frac{T_f}{\omega_f} \operatorname{th} \frac{\omega_f}{2\theta}\right) - \frac{1}{2V} \sum_{f, f'} J(f, f') \frac{L_f}{2\omega_f} \operatorname{th} \frac{\omega_f}{2\theta} \frac{L_{f'}}{2\omega_{f'}} \operatorname{th} \frac{\omega_{f'}}{2\theta}. \tag{6,30}$$

Выполняя во втором члене выражения (6,30) суммирование по f' с учетом (6,28), получим окончательно

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \sum_f T_f \left(1 - \frac{T_f}{\omega_f} \operatorname{th} \frac{\omega_f}{2\theta}\right) - \frac{1}{2} \sum_f \frac{L_f^2}{2\omega_f} \operatorname{th} \frac{\omega_f}{2\theta}. \tag{6,31}$$

При температуре, равной нулю, состояние с $L_f = 0$ соответствует меньшему значению энергии, т. е. энергетически более выгодно, чем состояние $L_f = 0$ (тривиальное решение уравнения (6,31)). Мы убедимся ниже (раздел 6.5), что при температуре ниже критической тривиальное решение невозможно.

Для временных корреляционных функций с использованием уравнений (6,26) — (6,27) найдем выражения

$$\langle a_f^+(t') a_f(t) \rangle = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{T_f}{\omega_f}\right) \frac{e^{-i\omega_f(t-t')}}{1 - e^{-\frac{\omega_f}{\theta}}} + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{T_f}{\omega_f}\right) \frac{e^{i\omega_f(t-t')}}{1 + e^{-\frac{\omega_f}{\theta}}}, \tag{6,32}$$

$$\langle a_f^+(t'), a_{-f}^+(t) a_{-f'}(t) a_{f'}(t) \rangle = \\ = A_f A_{f'} \cos \omega_f (t - t') \left\{1 + i \frac{\operatorname{tg} \omega_f (t - t')}{\operatorname{th} \frac{\omega_f}{2\theta}}\right\}. \tag{6,33}$$

Корреляционная функция (6,33) для идеального газа равна нулю. Корреляции этого типа, специфические для сверхпроводимости, связаны с взаимодействием. Временные корреляционные функции (6,32), (6,33) осциллируют при $t - t' \to \infty$, как и для идеального газа. Однако, если учесть отброшенные асимптотически малые члены, то в высших приближениях для корреляционных функций появилось бы асимптотически малое затухание, которое стремится к нулю при $V \to \infty$ (V/N-const).

Значит, если сохранить все члены, то не получим затухания. Правильно! Если оно обязательно это такое Харди-ах. Дело в виде оператора „взаимодействия" (6.1), а трех — оператор не N-операторное „ " типа пов (8.1) (см. ст. 107) но так и то же так.

6.3. Метод канонического преобразования

Представляет интерес сравнить на этом модельном примере изложенный метод функций Грина и метод Н. Н. Боголюбова канонического u,v-преобразования, который был применен к данной задаче в работе Н. Н. Боголюбова, Ю. А. Церковникова и автора.

Следуя методу указанной работы, введем некоторые обычные функции A_f и представим гамильтониан (6,1) в виде

$$\mathscr{H} = U + H_0 + H_1, \tag{6,34}$$

где

$$U = \frac{1}{2V} \sum_{f, f'} J(f, f') A_f A_{f'}, \tag{6,34а}$$

$$H_0 = \sum_f H_f = \sum_f \left\{ T_f a_f^+ a_f + \frac{1}{2} C_f (a_f^+ a_{-f}^+ + a_{-f} a_f) \right\}, \tag{6,34б}$$

$$H_1 = -\frac{1}{2V} \sum_{f, f'} J(f, f') B_f^+ B_{f'}, \tag{6,34в}$$

$$B_f = a_{-f} a_f - A_f \tag{6,34г}$$

и введено обозначение

$$C_f = -\frac{1}{V} \sum_{f'} J(f, f') A_{f'}. \tag{6,35}$$

Оператор H_0 представляет собой квадратичную форму от операторов a_f, a_f^+, поэтому его можно привести к диагональному виду каноническим преобразованием

$$a_f = u_f \alpha_f + v_f \alpha_{-f}^+, \tag{6,36}$$

$$u_f^2 + v_f^2 = 1, \quad u_f = u_{-f}, \quad v_f = -v_{-f} \tag{6,37}$$

(u_f, v_f — действительны).

Тогда

$$T_f u_f v_f + \frac{C_f}{2} (u_f^2 - v_f^2) = 0, \tag{6,38}$$

откуда, с учетом (6,37), получим

$$u_f^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{T_f}{\varepsilon_f}\right), \quad v_f^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{T_f}{\varepsilon_f}\right), \quad u_f v_f = -\frac{C_f}{2\varepsilon_f}, \tag{6,39}$$

где

$$\varepsilon_f = \sqrt{T_f^2 + C_f^2} \tag{6,40}$$

и

$$H_0 = \sum_f \{T_f v_f^2 + C_f u_f v_f\} + \sum_f \varepsilon_f \alpha_f^+ \alpha_f. \tag{6,41}$$

Заметим, что операторы H_f, B_f и B_f^+ коммутируют между собой при различных f.

Выберем A_f из условия

$$\langle B_f \rangle = 0, \tag{6,42}$$

где усреднение ведется по большому каноническому ансамблю с гамильтонианом H_0. (Для такого усреднения мы сохраним прежний символ $\langle \ldots \rangle$.)

Тогда

$$\left.\begin{aligned} A_f = \langle a_{-f} a_f \rangle = u_f v_f (1 - 2\nu_f) = -\frac{C_f}{2\varepsilon_f} \operatorname{th} \frac{\varepsilon_f}{2\theta}, \\ \nu_f = \langle \alpha_f^+ \alpha_f \rangle = \{1 + e^{\frac{\varepsilon_f}{\theta}}\}^{-1} \end{aligned}\right\} \tag{6,43}$$

и вклад от оператора H_1 при $V \to \infty$ становится пренебрежимо малым по сравнению с вкладом от $U + H_0$ (см. подробнее в работе [32]).

С учетом (6,35), (6,43), (6,42) получим для C_f уравнение

$$C_f = \frac{1}{2V} \sum_{f'} J(f, f') \operatorname{th} \frac{\varepsilon_{f'}}{2\theta} \frac{C_{f'}}{\varepsilon_{f'}}. \tag{6,44}$$

Сравнивая (6,20), (6,27), (6,28) с (6,40), (6,43), (6,44), убеждаемся, что

$$C_f = L_f, \quad A_f = A_f, \quad \varepsilon_f = \omega_f. \tag{6,45}$$

Таким образом, между методом предыдущего раздела и методом канонического преобразования существует полное соответствие, и они приводят к одинаковым решениям. Для термодинамического потенциала получим

$$\Omega = -\theta \ln \operatorname{Sp}\{e^{-\frac{U+H_0}{\theta}}\} = \sum_k T_k \left(1 - \frac{T_k}{\varepsilon_k}\right) - \sum_k \frac{C_k^2}{2\varepsilon_k} \operatorname{th} \frac{\varepsilon_k}{2\theta} - \\ - 2\theta \sum_k \ln \{1 + e^{\frac{\varepsilon_k}{\theta}}\}, \tag{6,46}$$

где мы заменили f на k, так как здесь все величины не зависят от спиновых переменных и, с учетом (6,37),

$$C_f = (-1)^{\sigma - \frac{1}{2}} C_k.$$

Легко заметить, что термодинамический потенциал (6,46) минимален по переменным u_f, v_f, как и должно быть для точного решения. Поэтому при вычислении энтропии нужно учитывать лишь явную зависимость Ω от температуры θ, члены, которые соответствуют зависимости u_f, v_f от температуры, автоматически выпадают. Поэтому получается выражение для энтропии по форме, совпадающее с энтропией идеального газа элементарных возбуждений

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial \theta} = -2 \sum_k \{\nu_k \ln \nu_k + (1 - \nu_k) \ln (1 - \nu_k)\}. \tag{6,47}$$

Такая простая формула имеет место лишь для функции распределения элементарных возбуждений ν_k, но не для действительной функции распределения по импульсам (6,24).

Метод канонического u, v преобразования позволил, таким образом, вычислить асимптотически точно термодинамический потенциал и энтропию системы. Метод функций Грина дает среднюю энергию, по которой затем можно восстановить и другие термодинамические функции.

Отметим одно интересное обстоятельство. Из формулы (6,43) следует, что

$$\langle a_{-f}, a_f \rangle \tag{6,48}$$

есть конечная величина. С другой стороны, если бы мы вели усреднение по ансамблю Гиббса не с H_0, а с полным гамильтонианом $\mathscr{H}$, то подобная величина была бы равна нулю. Действительно, оператор полного числа частиц

$$N = \sum_f a_f^+ a_f$$

коммутирует с $\mathscr{H}$, т. е. является интегралом движения. Следовательно, его собственные значения $N = 0, 1, 2, \ldots$ есть квантовые числа, нумерующие собственные значения $\mathscr{H}$. Расписывая (6,48) в явном виде

$$\langle a_{-f} a_f \rangle = Q^{-1} \sum_{\alpha, N} e^{-\frac{E_{\alpha, N}}{\theta}} C^*_{\alpha, N} a_{-f} a_f C_{\alpha, N}, \tag{6,49}$$

где $E_{\alpha, N}$ и $C_{\alpha, N}$ — собственные значения и собственные функции гамильтониана $\mathscr{H}$, соответствующие фиксированному N, убеждаемся, что эта величина действительно равна нулю, поскольку оператор $a_{-f} a_f$ не имеет диагональных элементов в представлении с фиксированным N

$$C^*_{\alpha, N} a_{-f} a_f C_{\alpha N} = 0.$$

Для доказательства существенно, чтобы N было точным интегралом. Для оператора H_0 (см. (6,34б)) оператор числа частиц N уже не является точно интегралом движения, и поэтому величины (6,48) не равны нулю.

6.4. Решение уравнений

Приведем решение интегрального уравнения (6,44), следуя работе [36]. Запишем уравнение (6,44) в интегральном виде

$$C(\xi) = \varrho \int_0^\infty d\xi' I\left(\frac{\xi}{\omega}, \frac{\xi'}{\omega}\right) \operatorname{th}\left(\frac{\varepsilon(\xi')}{2\theta}\right) \frac{C(\xi')}{\varepsilon(\xi')}, \tag{6,50}$$

где

$$I\left(\frac{\xi}{\omega}, \frac{\xi'}{\omega}\right) = J^{-1} \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} dt J(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left(t = \frac{(\mathbf{k}\mathbf{k}')}{kk}\right),$$

$$\varrho = \frac{J}{2\pi^2} \left(k^2 \frac{dk}{d\xi}\right)_{k=k_0} = J \frac{mk_0}{2\pi^2}, \quad \xi = T_k = \frac{k^2}{2m} - \mu.$$

Константу $J > 0$ подбираем так, чтобы $I(0, 0) = 1$, k_0 — граничный импульс Ферми, ω — характерная энергия (порядка энергии, соответствующей дебаевской предельной частоте фононов), при которой ядро $J(\xi, \xi')$ существенно отлично от нуля. Предполагаем, что ω значительно меньше предельной энергии Ферми, и выносим из-под знака интеграла медленно меняющуюся функцию $k(\xi) = \sqrt{2m(\mu + \xi)}$ в точке $\xi = 0$ $(k(0) = k_0)$.

Введем новую неизвестную функцию $\varphi(x)$ $(x = \xi/\omega)$

$$C(x) = C\varphi(x), \quad \varphi(0) = 1, \quad C = C(0) \tag{6,51}$$

и запишем уравнение (6,50) в виде

$$\left.\begin{aligned} \varphi(x) &= \varrho \int_0^\infty dx' I(x, x') \operatorname{th} \frac{\varepsilon(x')}{\alpha} \frac{\varphi(x')}{\varepsilon(x')}, \\ \varepsilon(x) &= \sqrt{x^2 + \beta^2 \varphi^2(x)}, \quad \alpha = \frac{2\theta}{\omega}, \quad \beta = \frac{C}{\omega}. \end{aligned}\right\} \tag{6,52}$$

При решении нелинейного интегрального уравнения (6,52) мы воспользуемся тем, что оно имеет логарифмические особенности при $x' \to 0$, $\alpha \to 0$, $\beta \to 0$ и эти параметры можно считать очень малыми ($a \ll 1$, $\beta \ll 1$). При $x = 0$ из (6,52) получим трасцендентное уравнение для α и β

$$1 = \varrho \int_0^\infty dx I(0, x) \operatorname{th} \frac{\varepsilon(x)}{\alpha} \frac{\varphi(x)}{\varepsilon(x)}. \tag{6,53}$$

Для его решения нужно знать еще функцию $\varphi(x)$. Чтобы найти приближенное уравнение для $\varphi(x)$ при $\alpha \ll 1$, $\beta \ll 1$, вычтем из уравнения (6,52) уравнение (6,53), умноженное на $I(x, 0)$ и, поскольку полученное уравнение уже не будет иметь особенностей, перейдем к пределу $\alpha \to 0$, $\beta \to 0$. Для $\varphi(x)$ получим неоднородное интегральное уравнение Фредгольма

$$\varphi(x) = I(x, 0) + \varrho \int_0^\infty \{I(x, x') - I(x, 0) I(0, x')\} \varphi(x') \frac{dx'}{x'}, \tag{6,54}$$

которое уже не содержит особенностей и не зависит от параметров α и β. Решение уравнения (6,53) в виде ряда по ϱ легко получить итерацией. Поэтому $\varphi(x)$ можно считать известной функцией. В случае факторизирующего ядра

$$I(x, x') = I(x, 0) I(x', 0) \tag{6,55}$$

получаем точное решение уравнения (6,54)

$$\varphi(x) = I(x, 0). \tag{6,56}$$

В частном случае модельного взаимодействия Бардина — Купера — Шриффера [30] имеем

$$I(x, 0) = \begin{cases} 1 \text{ при } -\frac{\omega}{\mu} \leqslant x \leqslant \frac{\omega}{\mu}, \\ 0 \text{ вне этого промежутка.} \end{cases} \tag{6,57}$$

Уравнение (6,53) можно упростить воспользовавшись малостью α и β и наличием логарифмических особенностей. Для этого проинтегрируем его по частям и положим в членах, не содержащих особенностей, $\alpha = \beta = 0$ $\left(\text{при предельном переходе считаем } \frac{\beta}{\alpha} = a = \text{const}\right)$. Тогда получим [36]

$$-\frac{1}{\varrho} = \ln a \operatorname{th} a + \ln \alpha + \int_a^\infty \ln (x + \sqrt{x^2 - a^2}) \operatorname{ch}^{-2} x \, dx + \\ + \int_0^\infty \ln 2x \frac{d}{dx} \{I(x, 0) \varphi(x)\} dx. \tag{6,58}$$

Уравнение (6,58) определяет β как функцию α, т. е. температурную зависимость энергетической щели C. При нулевой температуре $\alpha = 0$ и мы получаем решение Н. Н. Боголюбова [31]

$$\beta_0 = \frac{(C)_{\theta=0}}{\omega} = \exp \left\{ -\frac{1}{\varrho} - \int_0^\infty \ln 2x \frac{d}{dx} \{I(x, 0) \varphi(x)\} dx, \right. \tag{6,59}$$

где

$$I(x, x') = J^{-1} \int_0^{\frac{q_0}{k_0}} \frac{g^2 u^2 \, du}{2u + x + x'}, \tag{6,60}$$

$\omega = \frac{1}{2}\omega_q|_{q=k_0}$, q_0 — максимальный дебаевский импульс; g — константа взаимодействия, см. далее (8,2). При температуре, равной критической $\theta = \theta_0$, щель в спектре элементарных возбуждений обращается в нуль ($\beta = 0$ или $a = 0$) и из уравнения (6,58) найдем выражение для θ_0[36]

$$a_0 = \frac{2\theta_0}{\omega} = \exp\left\{-\frac{1}{\varrho} - \int_0^\infty \ln x \operatorname{ch}^{-2} x\, dx - \int_0^\infty \ln x \frac{d}{dx}[I(0, x)\varphi(x)]\, dx\right\}. \quad (6,61)$$

Отношение критической температуры к величине щели при нулевой температуре, так же как и относительный скачок теплоемкости, не зависят от функции φ и совпадают с выражениями, полученными в работе[30] для упрощенного взаимодействия (6,55). Таким образом, эти свойства не связаны с детальным видом взаимодействия, а лишь с особенностью интегральных уравнений.

6.5. Неустойчивость тривиального решения

Нетривиальное решение $A_f \neq 0$, $C_f \neq 0$ (см. 6,15) при $\theta < \theta_0$ соответствует более низкому значению термодинамического потенциала (6,46), т. е. термодинамически более устойчиво, чем тривиальное решение $A_f = 0$. Но дело не только в этом. Покажем, что при температуре ниже критической тривиальное решение $A_f = 0$ невозможно*). Действительно, допустим, что

$$\langle a_g^+ a_{-g}^+ a_{-f} a_f\rangle = 0 \quad \text{или} \quad A_f = 0,$$

тогда, удерживая во втором уравнении системы (6,14) также и неоднородный член, получим

$$(E - 2T_{f'} + T_f)\Gamma_{ff'} = \frac{n_f}{2\pi}(\delta_{f-f'} - \delta_{f+f'}) -$$
$$- \frac{1-2n_{f'}}{V}\sum_g J(f', g)\Gamma_{fg} - \frac{1}{V}\sum_g J(f', g)\Gamma_{fg}(\delta_{f+f'} + \delta_{f-f'}). \quad (6,62)$$

Полюса функции Грина $\Gamma_{ff'}$ найдем из условия обращения в нуль однородной части уравнения (6,62), т. е.

$$(E - 2T_{f'} + T_f)\Gamma_{ff'} + \frac{1-2n_{f'}}{V}\sum_g J(f', g)\Gamma_{fg} = 0, \quad (6,63)$$

где опустили асимптотически малые члены. В уравнении (6,63) индекс f является свободным, выбирая его так, чтобы $T_f = 0$ и вводя обозначения

$$\Phi_{f'} = \Gamma_{ff'}, \quad (6,64)$$

получим для Φ_f уравнение

$$(E - 2T_f)\Phi_f = -\frac{1-2\overline{n}_f}{V}\sum_{f'} J(f, f')\Phi_{f'}. \quad (6,65)$$

Интегральное уравнение (6,65) можно решить, если воспользоваться методом, использованным в работе[36].

Вводя обозначение

$$\mathscr{F}_f = -\frac{1}{V}\sum_{f'} J(f, f')\Phi_{f'}, \quad (6,66)$$

*) Соображения о невозможности двух решений (тривиального и нетривиального) при $\theta < \theta_0$ приводились Г. Вентцелем[70], который указывал, что термодинамический потенциал должен быть однозначной функцией по своему определению.

запишем уравнение (6,65) в виде

$$(E-2T_f)\,\Phi_f=(1-2\bar{n}_f)\,\mathscr{F}_f. \tag{6,67}$$

Подставляя в уравнение (6,66) Φ_f из уравнения (6,67), получим

$$\mathscr{F}_k=\frac{1}{2V}\sum_{k'} J(k,k')\frac{\operatorname{th}\frac{T_{k'}}{2\theta}}{T_{k'}-\frac{E}{2}}\mathscr{F}_{k'}, \tag{6,68}$$

где перешли от $f=(k,\sigma)$ к k.

Переходя от суммы к интегралу и вводя безразмерные переменные $x=\xi/\omega$ и новую функцию $f(x)$

$$\mathscr{F}(x)=\mathscr{F}(0)\,f(x)\qquad (f(0)=1), \tag{6,69}$$

получим для нее уравнение

$$f(x)=\varrho\int_0^\infty I(x,x')\operatorname{th}\frac{x'}{\alpha}\frac{2x'}{x'^2-\gamma^2}f(x')\,dx', \tag{6,70}$$

где $\gamma=\frac{E}{2\omega}$ — безразмерный параметр, который предполагается малым ($\gamma\ll 1$), остальные обозначения такие же, как в (6,50) — (6,52).

Уравнение (6,70) есть однородное интегральное уравнение Фредгольма с особенностями логарифмического типа при $\alpha\to 0$, $\gamma\to 0$.

Уравнение для $f(x)$ можно представить в виде неоднородного интегрального уравнения Фредгольма, если выделить из него члены с особенностями и, воспользовавшись малостью α и γ, перейти к пределу $\alpha\to 0$, $\gamma\to 0$ в членах, которые не содержат особенностей. (Эту же процедуру мы проделывали ранее с уравнением (6,52).) Получим таким образом

$$f(x)=I(x,0)+\varrho\int_0^\infty\{I(x,x')-I(x,0)\,I(0,x')\}\,f(x')\frac{dx'}{x'}. \tag{6,71}$$

Сравнивая (6,71) с (6,54), видим, что

$$f(x)=\varphi(x). \tag{6,72}$$

Параметр γ^2 как функцию α найдем из трансцендентного уравнения

$$1=\varrho\int_0^\infty I(0,x)\operatorname{th}\frac{x}{\alpha}\frac{x}{x^2-\gamma^2}\varphi(x)\,dx. \tag{6,73}$$

Например, при $\alpha=0$, интегрируя (6,70) по частям, получим

$$\frac{2}{\varrho}=-\ln(-\gamma^2)-\int_0^\infty \ln(x^2-\gamma^2)\frac{d}{dx}\{\varphi(x)\,I(0,x)\}\,dx. \tag{6,74}$$

Переходя во втором интеграле к пределу $\gamma\to 0$, получим

$$\gamma^2=\left(\frac{E}{2\omega}\right)^2=-\exp\left\{-\frac{2}{\varrho}-2\int_0^\infty \ln x\frac{d}{dx}\{\varphi(x)\,I(0,x)\}\,dx\right.=-\frac{C^2(0)}{4\omega^2}<0. \tag{6,75}$$

В точках $E=\pm iC(0)$ знаменатель функции Грина обращается в нуль.

Итак, исходя из равенства $A_f=0$, т. е. из существования тривиального решения, мы получили, что функция Грина имеет особенность в комплексной плоскости вне действительной оси, но поскольку она

должна быть аналитичной всюду, кроме действительной оси, таких решений не может существовать, следовательно $A_f = 0$. При температуре, равной критической, комплексный корень исчезает и имеется решение $E = 0$. Действительно, полагая в уравнении (6,73) $\gamma = 0$, получим уравнение (6,53) при $\beta = 0$, которое определяет критическую температуру.

Таким образом, применение функций Грина позволило нам, не привлекая дополнительных соображений, отобрать из двух решений единственное, физически пригодное.

§ 7. ПРИЛОЖЕНИЕ К ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА

Применение опережающих и запаздывающих функций Грина к термодинамике ферромагнетиков было дано в работах Н. Н. Боголюбова и С. В. Тябликова [19], а также С. В. Тябликова [38]. Мы будем следовать этим работам.

Согласно модели Гейзенберга ферромагнитный кристалл можно описывать гамильтонианом, выраженным через спиновые операторы

$$\mathscr{H} = -\mu_B H \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2 \alpha} J(f_1 - f_2) S_{f_1}^\alpha S_{f_2}^\alpha, \tag{7,1}$$

где S_f^α—компонента α спина электрона, находящегося в узле решетки f, $J(f_1 - f_2)$—обменный интеграл, который считается положительным, H—внешне магнитное поле, параллельное оси z, μ_B—магнетон Бора. Суммирование ведется по узлам с различными f, поэтому можно положить $J(0) = 0$. Будем считать, кроме того, что в каждом узле находится один электрон.

Перейдем в гамильтониане (7,1) от спиновых операторов к операторам Паули

$$\left.\begin{aligned} S_f^x &= b_f + b_f^+, \\ S_f^y &= i(b_f^+ - b_f), \\ S_f^z &= 1 - 2b_f^+ b_f, \end{aligned}\right\} \tag{7,2}$$

которые удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} & b_f b_f^+ + b_f^+ b_f = 1, \quad b_f^2 = (b_f^+)^2 = 0, \\ & \left.\begin{aligned} & b_f b_g^+ - b_g^+ b_f = 0, \\ & b_f b_g - b_g b_f = b_f^+ b_g^+ - b_g^+ b_f^+ = 0 \end{aligned}\right\} \text{ при } f \neq g, \end{aligned} \tag{7,3}$$

в чем легко убедиться непосредственной проверкой. Перестановочные соотношения для паулевских операторов имеют фермиевский характер для одинаковых узлов и бозевский для различных узлов. После преобразования гамильтониан (7,1) принимает вид

$$\begin{aligned} \mathscr{H} = & -N\left(\mu_B H + \frac{\mathcal{J}(0)}{2}\right) + (2\mu_B H + 2\mathcal{J}(0)) \sum_f b_f^+ b_f - \\ & - \sum_{f_1 f_2} 2J(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2} - \sum_{f_1 f_2} 2J(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2}, \end{aligned} \tag{7,4}$$

где $\mathcal{J}(0) = \sum_f J(f)$, N — число узлов в решетке. Оператор n_f

$$n_f = b_f^+ b_f \tag{7,5}$$

представляет число электронов с «левым» спином у узла f. Среднее число «левых» спинов у любого узла решетки

$$\bar{n} = \langle n_f \rangle \tag{7,6}$$

не зависит от f вследствие трансляционной симметрии и тождественности узлов решетки. Кроме того, из уравнений движения n_f следует, что

$$\left\langle \frac{dn_f}{dt} \right\rangle = \frac{d\bar{n}}{dt} = 0. \tag{7,7}$$

Операторы b_g и n_g удовлетворяют уравнениям движения

$$i\frac{db_g}{dt} = [2\mu_B + 2\mathcal{J}(0)]\, b_g + \sum_p 2J(g-p)\, b_p + \sum_p 4J(g-p)(n_g b_p - b_g n_p), \tag{7,8}$$

$$i\frac{dn_g}{dt} = -2\sum_p J(g-p)(b_g^+ b_p - b_p^+ b_g).$$

Введем функции Грина ($\eta = 1$)

$$\begin{gathered} G_{g,\,f}(t-t') = \langle\langle b_g(t);\ b_f^+(t')\rangle\rangle, \\ G_{g_1 g_2,\,f}(t-t') = \langle\langle n_{g_1}(t)\, b_{g_2}(t);\ b_f^+(t')\rangle\rangle. \end{gathered} \tag{7,9}$$

Для $G_{g,\,f}$ получим, с использованием (7,8), уравнение

$$i\frac{dG_{g,f}}{dt} = (1-2\bar{n})\,\delta(t-t') + [2\mu_B H + 2\mathcal{J}(0)]\, G_{g,f} - \\ - \sum_p 2J(g-p)\, G_{p,\,f} + \sum_p 4J(g-p)(G_{gp,\,f} - G_{pg,\,f}). \tag{7,10}$$

Далее мы ограничимся первым приближением и расцепим цепочку для функций Грина, принимая

$$G_{gp,\,f}(t-t') = \langle\langle n_g(t)\, b_p(t);\ b_f^+(t')\rangle\rangle = \langle n_g\rangle \langle\langle b_p(t);\ b_f^+(t')\rangle\rangle = \bar{n} G_{p,\,f}(t-t'). \tag{7,11}$$

Тогда уравнение (7,10) принимает вид

$$i\frac{dG_{g,f}}{dt} - [2\mu_B H + (1-2\bar{n})\, 2\mathcal{J}(0)]\, G_{g,\,f} + \sum_p (1-2\bar{n})\, 2J(g-p)\, G_{p,\,f} = \\ = (1-2\bar{n})\,\delta(t-t')\,\delta_{gf} \tag{7,12}$$

и в нем уже не содержится высших функций Грина.

Способ расцепления (7,11) соответствует методу приближенного вторичного квантования [39], улучшенному термодинамическим путем на область более высоких температур. В самом деле, в методе [39] операторы Паули приближенно считаются бозевскими и пренебрегают последним членом в гамильтониане (7,4), что соответствует области низких температур, значительно ниже температуры Кюри. В этом приближении в уравнении (7,12) надо положить $\bar{n} = 0$. С ростом температуры роль членов, содержащих множитель $\bar{n}$, возрастает и их уже следует учитывать.

Перейдем теперь к фурье-компонентам функций Грина

$$G_{g,\,f}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{g,\,f}(E)\, e^{-iEt} dE \tag{7,13}$$

и запишем уравнение (7,12) в виде

$$EG_{g,f}=\frac{1}{2\pi}(1-2\bar{n})\,\delta_{gf}+[2\mu_B H+(1-2\bar{n})\,2\mathcal{J}(0)]\,G_{g,f}-$$
$$-\sum(1-2\bar{n})\,2J(g-p)\,G_{p,f}. \quad (7,14)$$

Уравнение (7,14) можно решить обычным методом, применяемым в теории ферромагнетизма и основанным на трансляционной симметрии решетки. Учитывая, что при этом $G_{g,f}$ зависит лишь от разности векторов решетки $g-f$ и есть периодическая функция, перейдем к фурье-компонентам по этим переменным

$$G_{q,f}(E)=\frac{1}{N}\sum_q e^{i(g-f,q)}G_q(E)\ \ (q-\text{волновой вектор}). \quad (7,15)$$

Символ Кронекера $\delta_{g,f}$ также можно представить в виде

$$\delta_{g,f}=\frac{1}{N}\sum_q e^{i(g-f,q)}. \quad (7,16)$$

Подставляя (7,15) (7,16) в уравнение (7,14), получим

$$G_q(E)=\frac{1}{2\pi}\frac{1-2\bar{n}}{E-E_q}, \quad (7,17)$$

где

$$E_q=2\mu_B H+(1-2\bar{n})\,2(\mathcal{J}(0)-\mathcal{J}(q)), \quad (7,18)$$

$$\mathcal{J}(q)=\sum_f J(f)\,e^{i(f,q)}. \quad (7,19)$$

С помощью (3,25), (3,27) для спектральной интенсивности найдем

$$\left.\begin{aligned} I_q(\omega)&=\frac{1-2\bar{n}}{e^{E_q/\theta}-1}\,\delta(\omega-E_q),\\ I_{g,f}(\omega)&=\frac{1}{N}\sum_q e^{i(g-f,q)}I_q(\omega)=\frac{1}{N}\sum_q\frac{1-2\bar{n}}{e^{E_q/\theta}-1}e^{i(g-f,q)}\delta(\omega-E_q).\end{aligned}\right\} \quad (7,20)$$

Следовательно, согласно (3,7а) имеем

$$\langle b_f^+(t')\,b_g(t)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}I_{g,f}(\omega)\,e^{-i\omega(t-t')}d\omega=\frac{1}{N}\sum_q e^{i(g-f,q)}e^{-iE_q(t-t')}\frac{1-2\bar{n}}{e^{\frac{E_q}{\theta}}-1}.$$

Полагая здесь $t'=t$, $f=g$ и переходя от суммы по q к интегралу, получим для $\bar{n}$ трансцендентное уравнение [19]

$$\frac{n}{1-2\bar{n}}=\frac{}{(2\pi)^3}\int\frac{dq}{e^{E_q/\theta}-1}, \quad (7,21)$$

где $v=V/N$ — объем элементарной ячейки.

Уравнение (7,21) определяет относительную намагниченность σ

$$\sigma=\langle S_g^z\rangle=1-2\bar{n}. \quad (7,22)$$

Вводя безразмерные переменные

$$h=\frac{\mu_B H}{\mathcal{J}(0)},\quad \tau=\frac{\theta}{\mathcal{J}(0)},\quad i(q)=\frac{\mathcal{J}(q)}{\mathcal{J}(0)} \quad (7,23)$$

(h — безразмерное магнитное поле, τ — безразмерная температура, $i(q)$ — безразмерный обменный интеграл), перепишем (7,21) в виде

$$\frac{1}{\sigma}=\frac{v}{(2\pi)^3}\int \operatorname{cth}\frac{h+\sigma(1-i(q))}{\tau}\,dq. \tag{7,24}$$

В рассмотренном первом приближении функция Грина имеет полюс на вещественной оси при $E=E_q$; следовательно, E_q есть энергия элементарного возбуждения спиновой волны, зависящая, в отличие от обычной теории спиновых волн, от температуры через σ. В высших приближениях полюс исчезает и появляется затухание. Роль затухания мы рассмотрим в § 8 на примере электронов, взаимодействующих с решеткой.

Уравнение (7,24) весьма интересно тем, что оно дает интерполяционную формулу для намагниченности σ в широкой области температур для рассматриваемого случая положительного обменного интеграла. При отрицательных значениях обменного интеграла решение не будет устойчиво в достаточно слабых полях (правая часть (7,21) становится отрицательной, тогда как $\bar{n}>0$).

Решая уравнение (7,24) [38], получим для относительной намагниченности σ формулу

$$\sigma=\begin{cases} 1-\sum\limits_{j\geqslant 3} A_j\tau^{\frac{j}{2}}, & \tau<\tau_c \qquad (7,25а)\\ \sqrt{\frac{3}{\tau}\left(1-\frac{\tau}{\tau_c}\right)}\left\{1+\frac{1}{20}\frac{3}{\tau}\left(1-\frac{\tau}{\tau_c}\right)+\right. & \\ \left.+5\cdot 10^{-4}\left[\frac{3}{\tau}\left(1-\frac{\tau}{\tau_c}\right)\right]^2\right\}, & \tau\leqslant\tau_c\ (\tau_c-\tau\ll 1),\ h=0, \qquad (7,25б)\\ \sigma=t_0+t_0(1-t_0^2)\frac{1}{\tau}+t_0(1-t_0^2)\left(\frac{\nu-1}{\nu}-2t_0^2\right)\frac{1}{\tau^2}, & \tau>\tau_c, \qquad (7,25в)\end{cases}$$

$$t_0=\operatorname{th}\left(\frac{h}{\tau}\right),\ c=\frac{v}{(2\pi)^3}\int\frac{dq}{1-i(q)},$$

где $\tau_c=\frac{\theta_c}{\mathcal{J}(0)}=\frac{1}{c}$ — безразмерная температура Кюри. Для простой кубической решетки $c=1{,}516$, ν — число ближайших соседей в решетке; A_j — функция от $\frac{h}{\tau}$.

$$\left.\begin{aligned} &A_3=\frac{2v}{(8\pi\alpha)^{3/2}}z_{\frac{3}{2}}\left(\frac{h}{\tau}\right)\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{3}{2}},\ A_4=0,\ A_5\neq 0;\ A_6\neq 0,\\ &\alpha=\frac{1}{6\mathcal{J}(0)}\sum_f f^2J(f); \qquad z_p=\sum_{n=1}^{\infty}n^{-p}\exp\left(-\frac{nh}{\tau}\right).\end{aligned}\right\} \tag{7,26}$$

Из трансцендентного уравнения (7,24) и формул (7,25а, б, в) следует, что при температурах меньших температуры Кюри $\theta_c=\frac{\mathcal{J}(0)}{c}$ существует спонтанная намагниченность, т. е. $\sigma\neq 0$ при $H=0$, и система находится в ферромагнитном состоянии. При температуре Кюри спонтанная намагниченность обращается в нуль. При $\theta>\theta_c$ система переходит в парамагнитное состояние. Уравнение (7,24) и формулы (7,25а, б, в) описывают весь этот переход. При этом в качестве предельных случаев мы получаем все известные результаты квантовой теории ферромагнетизма.

Действительно, при $\theta \leqslant \theta_c$ из (7,25а) получаем блоховскую теорию спиновых волн, вблизи температуры Кюри $\theta \lesssim \theta_c$ из (7,25б) получаем результаты теории молекулярного поля, а при $\theta > \theta_c$ из (7,25в)—теорию паромагнетизма, близкую к результатам Опеховского[40], полученным с помощью термодинамической теории возмущений (различие в третьем члене).

Таким образом, в работах [19, 38] удалось существенно усовершенствовать квантовую теорию ферромагнетизма и построить уравнение для намагниченности (7,24), пригодное во всем интервале температур. (Первые попытки в этом направлении см. в [41,42].) Конечно, это уравнение носит отчасти интерполяционный характер, однако совпадение в главных членах при температурах значительно меньших температуры Кюри, в области температуры Кюри и при температурах значительно больших температуры Кюри с известными результатами теории спиновых волн, теории молекулярного поля и регулярной теории возмущений показывает, что эта интерполяция является достаточно гибкой. В весьма интересной работе Дайсона[43] по теории ферромагнетизма получено $A_4 = A_6 = 0$ в отличие от (7,26). По-видимому, это указывает, что для уточнения результатов нужно учитывать функции Грина более высокого порядка.

Можно получить результаты работ [19,38], составляя цепочку уравнений для функций Грина, построенных непосредственно из спиновых операторов[44]. Методика работ [19,38] применена также для усовершенствования квантовой теории антиферромагнетизма[44] и теории магнитной анизотропии[45].

§ 8. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С РЕШЕТКОЙ

8.1. Взаимодействие электронов с решеткой в металле.

В настоящем параграфе мы рассмотрим систему электронов, взаимодействующих с фононами решетки. Мы будем иметь в виду металлы в нормальном состоянии и, следуя работе [19], ограничимся простейшим приближением, которое недостаточно для учета эффектов типа сверхпроводимости. Однако этот пример, который носит методический характер, позволит нам выяснить ряд важных свойств системы взаимодействующих частиц, которые будут иметь место и для других систем, а именно: наличие затухания и его влияние на функции распределения. Система электронов, взаимодействующих с фононами для несверхпроводящего состояния при температуре, равной нулю, методом функций Грина была рассмотрена в [46,47], причем в последней работе исследована роль затухания. (Теорию сверхпроводимости на основе гамильтониана Фрелиха см. в работах [31,64].) В настоящем параграфе мы будем следовать работе [19], дополнив ее рассмотрением фононных функций Грина.

Система электронов в решетке описывается гамильтонианом Фрелиха

$$\mathscr{H} = \sum_{k,\sigma} T_k a^+_{k\tau} a_{k\sigma} + \sum_q \omega_q b^+_q b_q + \sum_{\substack{k_1, k_2 q \sigma \\ (k_1 - k_2 = q)}} A_q a^+_{k_1\sigma} a_{k_2\sigma} (b_q + b^+_{-q}), \qquad (8,1)$$

где $T_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$, μ — химический потенциал, ω_q — энергия фонона, $a^+_{k\sigma}$, $a_{k\sigma}$, b^+_q, b_q — операторы порождения и уничтожения электронов и фононов соответственно, функция A_q определяет связь электронов с фононным полем

$$A_q = g(q) \left(\frac{\omega_q}{2V} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (g(q) = g(-q)). \qquad (8,2)$$

Операторы $a^+_{k\sigma}$, $a_{k\sigma}$, b^+_q, b_q удовлетворяют уравнениям движения:

$$\left.\begin{aligned} i\frac{da_{k\sigma}}{dt} &= T_k a_{k\sigma} + \sum_q A_q a_{k-q,\,\sigma}(b_q + b^+_{-q}),\\ -i\frac{da^+_{k\sigma}}{dt} &= T_k a^+_{k\sigma} + \sum_q A_q a^+_{k+q,\,\sigma}(b_q + b^+_{-q}),\\ i\frac{db_q}{dt} &= \omega_q b_q + \sum_{k,\,\sigma} A_q a^+_{k-q,\,\sigma}\, a_{k\sigma},\\ -i\frac{db^+_q}{dt} &= \omega_q b^+_q + \sum_{k,\sigma} A_q a^+_{k+q,\sigma}\, a_{k\sigma}. \end{aligned}\right\} \qquad (8,3)$$

Введем одночастичные функции Грина фермионного и фононного типа G_k и G_q (в работе [19] были рассмотрены лишь фермионные функции Грина G_k)

$$\left.\begin{aligned} G_k(t-t') &= \langle\langle a_{k\sigma}(t);\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle \quad (\eta = -1),\\ G_q(t-t') &= \langle\langle b_q(t);\ b^+_q(t')\rangle\rangle \quad (\eta = 1) \end{aligned}\right\} \qquad (8,4)$$

и составим для них уравнения движения:

$$\left.\begin{aligned} i\frac{dG_k}{dt} &= \delta(t-t') + T_k G_k + \sum_q A_q \langle\langle a_{k-q,\,\sigma}(b_q + b^+_{-q});\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle,\\ i\frac{dG_q}{dt} &= \delta(t-t') + \omega_q G_q + \sum_{k,\,\sigma} A_q \langle\langle a^+_{k-q,\,\sigma} a_{k\sigma};\ b^+_q(t')\rangle\rangle. \end{aligned}\right\} \qquad (8,5)$$

Из уравнений (8,5) мы видим, что удобно ввести функции Грина смешанного типа, содержащие как фермиевские, так и бозевские операторы:

$$\left.\begin{aligned} \Gamma_{k-q,\,q,\,k}(t-t') &= \langle\langle a_{k-q,\,\sigma}(t)\, b_q(t);\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle \quad (\eta = -1),\\ \Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}(t-t') &= \langle\langle a_{k-q,\,\sigma}(t)\, b^+_{-q}(t);\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle \quad (\eta = -1),\\ G_{k-q,\,k,\,q}(t-t') &= \langle\langle a^+_{k-q,\,\sigma}(t)\, a_{k\sigma}(t);\ b^+_q(t')\rangle\rangle \quad (\eta = 1). \end{aligned}\right\} \qquad (8,6)$$

Для функций Грина (8,4),(8,6) получим систему точных уравнений:

$$i\frac{dG_k}{dt} = \delta(t-t') + T_k G_k + \sum_q A_q(\Gamma_{k-q,\,q,\,k} + \Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}), \qquad (8,7а)$$

$$i\frac{dG_q}{dt} = \delta(t-t') + \omega_q G_q + \sum_{k,\,\sigma} A_q G_{k-q,\,k,\,q}, \qquad (8,7б)$$

$$i\frac{d\Gamma_{k-q,\,q,\,k}}{dt} = (T_{k-q} + \omega_q)\,\Gamma_{k-q,\,q,\,k} + \sum_{q_1} A_{q_1} \langle\langle a_{k-q-q_1}(b_{q_1} + b^+_{-q_1})\, b_q;\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle +$$
$$+ \sum_{k_1\sigma_1} A_q \langle\langle a_{k-q,\,\sigma} a^+_{k_1-q,\,\sigma_1} a_{k_1\sigma_1};\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle \qquad (8,7в)$$

$$i\frac{d\Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}}{dt} = (T_{k-q} - \omega_q)\Gamma^1_{k-q,\,q,\,k} +$$
$$+ \sum_{q_1} A_{q_1} \langle\langle a_{k-q-q_1,\,\sigma}(b_{q_1} + b^+_{-q_1})\, b^+_{-q};\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle -$$
$$- \sum_{k_1\sigma_1} A_q \langle\langle a_{k-q,\,\sigma},\ a^+_{k_1-q,\,\sigma_1} a_{k_1\sigma_1},\ a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle, \qquad (8,7г)$$

$$\frac{dG_{k-q,\,k,\,q}}{dt} = (T_k - T_{k-q})\, G_{k-q,\,k,\,q} +$$

$$+ \sum_{q_1} A_{q_1} \langle\langle a^+_{k-q,\,\sigma} a_{k-q_1,\,\sigma} (b^+_{q_1} + b^+_{-q_1});\ \ b^+_q\,(t')\rangle\rangle -$$

$$- \sum_{q_1} A_{q_1} \langle\langle a^+_{k-q+q_1,\,\sigma} (b_{q_1} + b^+_{-q_1})\, a_{k\sigma};\ \ b^+_q\ \ (t')\rangle\rangle. \quad (8{,}7д)$$

(Три последних уравнения не содержат неоднородной части, так как $q \neq 0$.)

Уравнения (8,7) содержат, кроме введенных функций Грина (8,4) — (8,6), также функции Грина более высокого порядка, для которых, в свою очередь, можно было бы составить уравнения движения и продолжить этот процесс далее. Заметим, что энергия выражается лишь через функции Грина (8,4) — (8,6). Если расцепить цепочку уравнений для функций Грина (8,7), приняв для высших функций Грина какую-либо апроксимацию, то вносимая при этом неточность будет тем меньше, чем выше порядок функций Грина, для которых производится расцепление. Хорошо известно, например, что в классической статистике довольно простая апроксимация для тернарной корреляционной функции приближенно отражает некоторые свойства жидкого состояния [48, 49]. Для системы, с прямым взаимодействием простейшее расцепление цепочки, при котором вторая корреляционная функция выражается через первые, приводит к методу Хартри—Фока, соответствующая апроксимация для тройной функции Грина приводит к обобщению метода Фока [18].

Мы произведем простейшее интерполяционное расцепление высших функций Грина, входящее в уравнения (8,7), выполнив возможные спаривания операторов, относящихся к одному и тому же моменту времени:

$$\left.\begin{aligned}
&\langle\langle a_{k-q-q_1,\,\sigma} (b_{q_1} + \underbrace{b^+_{-q_1})\, b_q}; \quad a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle = \delta_{q+q_1} \nu_q G_k (t - t'),\\
&\langle\langle \underbrace{a_{k-q,\,\sigma} a^+_{k_1-q_1,\,\sigma_1}} a_{k_1\sigma_1}; \quad a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle = \delta_{k_1-k}\, \delta_{\sigma-\sigma_1} (1 - n_{k-q})\, G_k (t - t'),\\
&\langle\langle a_{k-q-q_1,\,\sigma} (\underbrace{b_{q_1} + b^+_{-q_1})\, b^+_{-q}}; \quad a^+_{k\sigma}(t')\rangle\rangle = \delta_{q+q_1} (1 + \nu_q)\, G_k (t - t'),\\
&\langle\langle \underbrace{a^+_{k-q,\,\sigma} a_{k-q_1,\,\sigma}} (b_{q_1} + b^+_{-q_1});\quad b^+_q\,(t')\rangle\rangle = \delta_{q_1-q} n_{k-q} G_q (t - t'),\\
&\qquad \nu_q = \langle b^+_q b_q\rangle, \quad n_k = \langle a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}\rangle.
\end{aligned}\right\} \quad (8{,}8)$$

Апроксимация (8,8) является довольно грубой, в частности, она недостаточна для учета корреляции электронов, которая приводит к сверхпроводящему состоянию [30, 31] и которая существенна при низких температурах *).

Можно было бы, не расцепляя функций Грина (8,8) составить для них уравнения движения и произвести приближенное расцепление для функций Грина более высокого порядка, входящих в эти уравнения. Мы не будем этого делать и ограничимся простейшим приближением (8,8), так как оно достаточно просто и отражает ряд интересных свойств системы взаимодействующих частиц. С помощью (8,8) получим

*) Можно с помощью этого же метода получить результаты теории сверхпроводимости, если при расцеплении функций Грина (8,8) учесть также функции типа $\langle\langle a_{k\sigma}(t);\ a_{-k,\,-\sigma}(t')\rangle\rangle$ (см [64]), т. е. учесть корреляции электронов с противоположным направлением импульсов и спинов.

приближенную систему уравнений для функций Грина

$$\left.\begin{aligned}
i\frac{dG}{dt} &= \delta(t-t') + T_k G_k + \sum_q A_q(\Gamma_{k-q,\,q,\,k} + \Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}),\\
i\frac{dG_q}{dt} &= \delta(t-t') + \omega_q G_q + \sum_{k,\,\sigma} A_q G_{k-q,\,k,\,q},\\
\frac{i d\Gamma_{k-q,\,q,\,k}}{dt} &= (T_{k-q} + \omega_q)\Gamma_{k-q,\,q,\,k} + A_q(\nu_q + 1 - n_{k-q})G_k,\\
i\frac{d\Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}}{dt} &= (T_{k-q} - \omega_q)\Gamma^1_{k-q,\,q,\,k} + A_q(n_{k-q} + \nu_q)G_k,\\
i\frac{dG_{k-q,\,k,\,q}}{dt} &= (T_k - T_{k-q})G_{k-q,\,q,\,k} + A_q(n_{k-q} - n_k)G_q.
\end{aligned}\right\} \qquad (8,9)$$

Заметим, однако, что первые два уравнения из этой системы являются точными. Система (8,9) есть оборванная цепочка уравнений для функций Грина. Переходя в ней к фурье-компонентам функций Грина:

$$\left.\begin{aligned}
G_k(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} G_k(E)\,e^{-iEt}\,dE;\ G_q(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G_q(E)\,e^{-iEt}\,dE,\\
\Gamma_{k-q,\,q,\,k}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{k-q,\,q,\,k}(E)\,e^{-iEt}\,dE,\\
\Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma^1{}_{k-q,\,q,\,k}(E)\,e^{-iEt}\,dE,\\
G_{k-q,\,k,\,q}(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} G_{k-q,\,k,\,q}(E)\,e^{-iEt}\,dE;
\end{aligned}\right\} \qquad (8,10)$$

из последних трех уравнений системы (8,9) найдем

$$\left.\begin{aligned}
\Gamma_{k-q,\,q,\,k}(E) &= \frac{A_q(\nu_q + 1 - n_{k-q})}{E - T_{k-q} - \omega_q}G_k(E),\\
\Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}(E) &= \frac{A_q(n_{k-q} + \nu_q)}{E - T_{k-q} + \omega_q}G_k(E),\\
G_{k-q,\,k,\,q}(E) &= \frac{A_q(n_{k-q} - n_k)}{E - T_k + T_{k-q}}G_q(E).
\end{aligned}\right\} \qquad (8,11)$$

Тогда уравнения для $G_k(E)$, $G_q(E)$ принимают вид

$$\left.\begin{aligned}
\left\{E - T_k - \sum_q A_q^2\left[\frac{\nu_q + 1 - n_{k-q}}{E - T_{k-q} - \omega_q} + \frac{n_{k-q} + \nu_q}{E - T_{k-q} + \omega_k}\right]\right\}G_k(E) &= \frac{1}{2\pi},\\
\left\{E - \omega_q - \sum_{k,\,\sigma} A_q^2\frac{n_{k-q} - n_k}{E - T_k + T_{k-q}}\right\}G_q(E) &= \frac{1}{2\pi}.
\end{aligned}\right\} \qquad (8,12)$$

Введем функции $M_k(E)$ и $P_q(E)$, которые по аналогии с квантовой теорией поля можно назвать массовым и поляризационным операторами:

$$\left.\begin{aligned}
M_k(E) &= \sum_q A_q^2\left\{\frac{\nu_q + 1 - n_{k-q}}{E - T_{k-q} - \omega_q} + \frac{n_{k-q} + \nu_q}{E - T_{k-q} + \omega_q}\right\},\\
P_q(E) &= \sum_{k,\,\sigma} A_q^2\frac{n_{k-q} - n_k}{E - T_k + T_{k-q}}.
\end{aligned}\right\} \qquad (8,13)$$

Тогда

$$\left.\begin{aligned} G_k(E) &= \frac{1}{2\pi}\frac{1}{E-T_k-M_k(E)}, \\ G_q(E) &= \frac{1}{2\pi}\frac{1}{E-\omega_q-P_q(E)}. \end{aligned}\right\} \tag{8,14}$$

Таким образом, фермионная и бозонная одночастичные функции Грина выражаются через массовый и поляризационный оператор соответственно.

С помощью функций Грина можно найти и корреляционные функции

$$\left.\begin{aligned} \langle a^+_{k\sigma}(t')\, a_{k\sigma}(t)\rangle &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} J_k(\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}\, d\omega, \\ \langle b^+_q(t')\, b_q(t)\rangle &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} J_q(\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}\, d\omega, \end{aligned}\right\} \tag{8,15}$$

где, согласно (3,25), J_k, J_q определяются из соотношений

$$\left.\begin{aligned} G_k(\omega+i\varepsilon)-G_k(\omega-i\varepsilon) &= -iJ_k(\omega)\,(e^{\beta\omega}+1), \\ G_q(\omega+i\varepsilon)-G_q(\omega-i\varepsilon) &= -iJ_q(\omega)\,(e^{\beta\omega}-1). \end{aligned}\right\} \tag{8,16}$$

Функции распределения фермионов и бозонов, найдем, полагая $t=t'$ в уравнениях (8,15):

$$n_k = \int\limits_{-\infty}^{\infty} J_k(\omega)\, d\omega; \quad \nu_q = \int\limits_{-\infty}^{\infty} J_q(\omega)\, d\omega. \tag{8,17}$$

Раскрывая соотношения (8,16) с помощью (8,14), (8,13) с использованием символического тождества (3,29), получим

$$M_k(\omega \pm i\varepsilon) = M_k(\omega) \mp i\gamma_k(\omega); \quad P_q(\omega \pm i\varepsilon) = P_q(\omega) \mp i\gamma_q(\omega) \tag{8,19}$$

(ω — вещественно), где введены вещественные функции

$$\begin{aligned} M_k(\omega) &= P\sum_q A_q^2 \left\{\frac{\nu_q+1-n_{k-q}}{\omega-T_{k-q}-\omega_q}+\frac{n_{k-q}+\nu_q}{\omega-T_{k-q}+\omega_q}\right\}, \\ P_q(\omega) &= P\sum_{k,\,\sigma} A_q^2 \frac{n_{k-q}-n_k}{\omega-T_k+T_{k-q}}, \end{aligned} \tag{8,20}$$

$$\gamma_k(\omega) = \pi\sum_q A_q^2 \Big\{(\nu_q+1-n_{k-q})\,\delta(\omega-T_{k-q}-\omega_q)+$$
$$+(n_{k-q}+\nu_q)\,\delta(\omega-T_{k-q}+\omega_q)\Big\},$$

$$\gamma_q(\omega) = \pi\sum_{k,\,\sigma} A_q^2 (n_{k-q}-n_k)\,\delta(\omega-T_k+T_{k-q})$$

(P — означает, что соответствующий интеграл берется в смысле главного значения).

Функции $\gamma_k(\omega)$, $\gamma_q(\omega)$, зависящие также от температуры, имеют смысл затухания. При $q\to 0$ затухание $\gamma_q\to 0$.

Из соотношений (8,19) видно, что пределы значений массового и поляризационного оператора $M_k(E)$ и $P_q(E)$ при стремлении комплексного аргумента E к действительной оси сверху и снизу ($\pm i\varepsilon\to 0$) не совпадают, так как $\gamma_k(\omega)$, $\gamma_q(\omega)$ — конечные величины. Следовательно, функции $M_k(E)$ и $P_c(E)$ имеют особенности на действительной оси.

Для спектральных интенсивностей $J_k(\omega)$, $J_q(\omega)$ получим

$$\left.\begin{aligned} J_k(\omega) &= \frac{1}{\pi}\frac{\gamma_k(\omega)(e^{\beta\omega}+1)^{-1}}{\{\omega-T_k-M_k(\omega)\}^2+\gamma_k^2(\omega)}, \\ J_q(\omega) &= \frac{1}{\pi}\frac{\gamma_q(\omega)(e^{\beta\omega}-1)^{-1}}{\{\omega-\omega_q-P_q(\omega)\}^2+\gamma_q^2(\omega)}. \end{aligned}\right\} \tag{8,21}$$

(Выражения для M_k, γ_k, J_k получены в работе [19].) При γ_k, $\gamma_q \to 0$ спектральные интенсивности (8,21) стремятся к δ-образному распределению.

Для функций распределения электронов и фононов получим уравнения

$$\left.\begin{aligned} n_k &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\gamma_k(\omega)(e^{\beta\omega}+1)^{-1}}{\{\omega-T_k-M_k(\omega)\}^2+\gamma_k^2(\omega)}\,d\omega, \\ \nu_q &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\gamma_q(\omega)(e^{\beta\omega}-1)^{-1}}{\{\omega-\omega_q-P_q(\omega)\}^2+\gamma_q^2(\omega)}\,d\omega. \end{aligned}\right\} \tag{8,22}$$

Уравнения (8,20), (8,22) есть полная система уравнений для шести функций M_k, P_q, γ_k, γ_q, n_k, ν_q.

Таким образом, мы приходим к самосогласованной системе нелинейных уравнений, что весьма характерно для апроксимаций типа интерполяционных расцеплений цепочек для функций Грина.

В предельном случае, когда затухание можно считать очень малым функции (8,21) имеют острый максимум при некоторых значениях $\omega=\tilde{\varepsilon}_k$, $\omega=\tilde{\omega}_q$. Разлагая функции $M_k(\omega)$ и $P_q(\omega)$ в ряд по ω вблизи этих значений, считая, что $\gamma_k(\omega)$, $\gamma_q(\omega)$ при этом меняются медленно ($\gamma_k(\omega)\cong\gamma_k(\tilde{\varepsilon}_k)$, $\gamma_q(\omega)\cong\gamma_q(\tilde{\omega}_q)$), получим:

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{\pi}\frac{\gamma_k(\omega)}{\{\omega-T_k-M_k(\omega)\}^2+\gamma_k^2(\omega)} &\cong \frac{1}{\pi}\frac{\left[1-\left(\frac{dM_k}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\varepsilon}}\right]^{-1}\tilde{\gamma}_k(\tilde{\varepsilon}_k)}{(\omega-\tilde{\varepsilon}_k)^2+\tilde{\gamma}_k^2(\tilde{\varepsilon}_q)} \\ \frac{1}{\pi}\frac{\gamma_q(\omega)}{\{\omega-\omega_q-P_q(\omega)\}^2+\gamma_q^2(\omega)} &\cong \frac{1}{\pi}\frac{\left[1-\left(\frac{dP_q}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\omega}_q}\right]^{-1}\tilde{\gamma}_q(\tilde{\omega}_q)}{(\omega-\tilde{\omega}_q)^2+\tilde{\gamma}_q^2(\tilde{\omega}_q)}, \end{aligned}\right\} \tag{8,23}$$

где

$$\tilde{\gamma}_k=\gamma_k(\tilde{\varepsilon}_k)\left[1-\left(\frac{dM_k}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k}\right]^{-1};\quad \tilde{\gamma}_q=\gamma_k(\tilde{\omega}_q)\left[1-\left(\frac{dP_q}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\omega}_q}\right]^{-1};$$

$$\left(\frac{dM_k}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k}\ll 1,\left(\frac{dP_q}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\omega}_q}\ll 1$$

играют роль затухания и $\tilde{\varepsilon}_k$ и $\tilde{\omega}_q$ определяются из трансцендентных уравнений

$$\tilde{\varepsilon}_k-T_k-M_k(\tilde{\varepsilon}_k)=0;\qquad \tilde{\omega}_q-\omega_q-P_q(\tilde{\omega}_q)=0. \tag{8,24}$$

Заменяя выражения (8,23) при очень малых значениях затухания $\tilde{\gamma}_k$, $\tilde{\gamma}_q$ δ-функциями, для них будем иметь

$$\left[1-\left(\frac{dM_k}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k}\right]^{-1}\delta(\omega-\tilde{\varepsilon}_k),\quad \left[1-\left(\frac{dP_q}{d\omega}\right)_{\omega=\tilde{\omega}_q}\right]^{-1}\delta(\omega-\tilde{\omega}_q)$$

(см. (3,27)) и из уравнений (8,22), опуская малые члены, получим функции распределения электронов и фононов

$$n_k=(e^{\beta\tilde{\varepsilon}_k}+1)^{-1},\quad \nu_q=(e^{\beta\tilde{\omega}_q}-1)^{-1};\quad \left(\beta=\frac{1}{\theta}\right). \tag{8,25}$$

Следовательно, ε_k и ω_q имеют смысл энергии элементарных возбуждений электронов и фононов.

Как видно из формул (8,24), спектр элементарных возбуждений, зависящий от температуры, определяется действительной частью массового оператора для электронов и поляризационного оператора для фононов *).

Уравнения для элементарных возбуждений (8,24) с помощью (8,20) можно переписать в виде:

$$\left.\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_k &= T_k + P\sum_q A_q^2 \left\{ \frac{\nu_q + 1 - n_{k-q}}{\tilde{\varepsilon}_k - T_{k-q} - \omega_q} + \frac{n_{k-q} + \nu_q}{\tilde{\varepsilon}_k - T_{k-q} + \omega_q} \right\}, \\ \tilde{\omega}_q &= \omega_q + P\sum_{k,\sigma} A_q^2 \frac{n_{k-q} - n_k}{\tilde{\omega}_q - T_q + T_{k-q}} \end{aligned}\right\} \qquad (8,26)$$

(P означает интеграл в смысле главного значения).

Уравнения (8,22) для n_k и ν_q представляют распределения Ферми и Бозе, «размытые» вследствие взаимодействия. Ширина области размытия — порядка величины затухания $\tilde{\gamma}_k$, $\tilde{\gamma}_q$. Затухание согласно (8,19) определяется мнимой частью массового оператора для электронов или поляризационного оператора для фононов.

Таким образом, в рассмотренном примере мы видим, что понятие элементарных возбуждений имеет приближеный смысл в пренебрежении затуханием.

Особенности функций Грина (8,14), лежащие на действительной оси энергии (их существование следует из (8,16), так как спектральные интенсивности (8,21) не равны тождественно нулю), не имеют характера полюсов. Последнее ясно из соотношений (8,14), (8,19), так как γ_k и γ_q не равны тождественно нулю, т. е. существует затухание. Следовательно, функции Грина имеют линию разреза вдоль действительной оси. Лишь для приближенных функций Грина, в которых пренебрегается затуханием имеют место полюса на действительной оси и им соответствует энергия элементарных возбуждений (8,26).

Функции Грина высшего порядка $\Gamma_{k-q,\,q,\,k}(E)$, $\Gamma^1_{k-q,\,q,\,k}(E)$, $G^1_{k-q,\,k,\,q}(E)$ в данном приближении, основанном на расцеплении функций (8,8), обладают полюсами при E, равном $T_{k-q} + \omega_q$, $T_{k-q} - \omega_q$, $T_{k-q} - T_k$ соответственно. Если произвести расцепление не для функций Грина (8,8), а для функций Грина еще более высокого порядка, то фурье-компоненты функций Грина (8,6) уже не будут иметь полюсов и для них будет иметь место затухание, как и для одночастичных функций Грина.

8.2. Взаимодействие электронов с решеткой в полупроводниках

Обычные способы вычисления электропроводности, исходя из кинетического уравнения Блоха, справедливы лишь в том случае, если можно говорить о соударении электронов, т. е. если среднее время свободного пробега электронов τ значительно больше неопределенности во времени соударений [58, 55], т. е. $\tau \gg \frac{h}{kT}$. Для полупроводников этот критерий выполняется очень плохо [58], поэтому кинетическое уравнение дает лишь весьма грубую оценку.

*) Подобные соотношения для гамильтониана Фрелиха в случае температуры получены в [47]. Для гамильтониана с прямым взаимодействием и отличной от нуля температуры — в [18].

Квантовая теория электропроводности без применения кинетического уравнения Блоха была недавно рассмотрена Коном и Лютингером [60], которые решили уравнения движения для полной матрицы плотности с помощью теории возмущений, в которой учитывалось затухание. Уравнения для матрицы плотности с учетом затухания впервые рассмотрел Ван-Хове [61].

Мы изложим кратко метод вычисления электропроводности полупроводников с помощью функций Грина. Для полупроводников, когда плотность электронов мала, можно исходить из модели одного электрона, взаимодействующего с фононным полем. В этом случае можно воспользоваться также гамильтонианом (8,1), наложив дополнительное условие, что число электронов N равно единице

$$N = \sum_{k\sigma} a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} = 1. \tag{8,27}$$

При этом следует учитывать, что для любого оператора равны нулю выражения

$$\langle a^+_{k_1\sigma_1} \ldots a^+_{k_s\sigma_s} a_{q_1\sigma'_1} \ldots a_{q_r\sigma'_r} B\rangle = 0, \tag{8,28}$$

если $s > 1$ или $r > 1$, что сильно упрощает задачу.

Поскольку рассматривается лишь один электрон, мы не можем применять большой ансамбль Гиббса с переменным числом частиц, а должны пользоваться каноническим ансамблем Гиббса, в котором число частиц постоянно. Поэтому в настоящем разделе мы обозначаем $\langle \ldots \rangle$ усреднение по каноническому ансамблю Гиббса.

Рассмотрим взаимодействие электрона с фононным полем для случая слабой связи.

Введем функции Грина, в которых операторы A и B перестановочны с оператором полного числа частиц ($\eta = 1$):

$$\left.\begin{aligned} G_{p_1p_2;\, g_2g_1}(t-t') &= \langle\langle a^+_{p_1}(t)\, a_{p_2}(t);\ a^+_{g_2}(t')\, a_{g_1}(t')\rangle\rangle, \\ G_{p_1qp_2;\, g_2g_1}(t-t') &= \langle\langle a^+_{p_1}(t)\, b_q(t)\, a_{p_2}(t);\ a^+_{g_2}(t')\, a_{g_1}(t')\rangle\rangle, \\ G_{p_1qp_2;\, g_2g_1}(t-t') &= \langle\langle a_{p_1}(t)\, b^+_{-q}(t)\, a_{p_2}(t);\ a^+_{g_2}(t')\, a_{g_1}(t')\rangle\rangle \end{aligned}\right\} \tag{8,29}$$

(спиновые индексы опускаем), и составим для них цепочку уравнений:

$$i\frac{dG_{p_1p_2;\, g_2g_1}}{dt} = \delta(t-t')\,\delta_{p_1-g_1}\delta_{p_2-g_2}(n_{p_1}-n_{p_2}) + (T_{p_2}-T_{p_1})\,G_{p_1p_2;\, g_2g_1} + \\ + \sum_{-p'_2-p_1=q} A_q\,(G_{p_1qp'_2;\, g_2g_1} + G^1_{p_1qp'_2,\, g_2g_1}) - \sum_{p'_1-p_1=q} A_q\,(G_{p'_1qp_2;\, g_2g_1} + G^1_{p'_1qp_2;\, g_2g_1}), \tag{8,30а}$$

$$i\frac{dG_{p_1qp_2;\, g_2g_1}}{dt} = \delta(t-t')\{\delta_{p_2-g_2}\langle a^+_{p_1}b_q a_{g_1}\rangle - \delta_{p_1-q_1}\langle a^+_{g_2}b_q a_{p_2}\rangle + (T_{p_2}-T_{p_1}+\omega_q)\times \\ \times G_{p_1qp_2,\, g_2g_1} - \sum_{k_1-p_1=q_1} A_{q_1}\langle\langle a^+_k\,(b_{q_1}+b^+_{-q_1})\,b_q a_{p_2};\ a^+_{g_2}(t')\,a_{g_1}(t')\rangle\rangle + \\ + \sum_{p_2-k_1=q_1} A_{q_1}\langle\langle a^+_{p_1}b_q a_{k_1}\,(b_q+b^+_{-q});\ a^+_{g_2}(t')\,a_{g_2}(t')\rangle\rangle, \tag{8,30б}$$

$$i\frac{dG^1_{p_1qp_2;\, g_2g_1}}{dt} = \delta(t-t')\{\delta_{p_2-g_2}\langle a^+_{p_1}b^+_{-q}a_{g_1}\rangle - \delta_{p_1-g_1}\langle a^+_{g_1}b^+_{-q}a_{p_2}\rangle\} + (T_{p_2}-T_{p_1}-\omega_q)\times \\ \times G^1_{p_1qp_2;\, g_2g_1} - \sum_{k_1-p_1=q_1} A_{q_1}\langle\langle a^+_{k_1}\,(b_{q_1}+b^+_{-q_1})\,b^+_{-q}a_{p_2};\ a^+_{g_2}(t')\,a_{g_1}(t')\rangle\rangle + \\ + \sum_{p_2-k_1=q_1} A_{q_1}\langle\langle a^+_{p_1}b^+_{-q}\,(b_{q_1}+b^+_{-q_1})\,a_{k_1};\ a^+_{g_2}(t')\,a_{g_1}(t')\rangle\rangle. \tag{8,30в}$$

В случае малой плотности электронов можно пренебречь обратным влиянием электронов на решетку и считать, что средние числа заполнения для фононов решетки

$$\nu_q = \langle b_q^+ b_q \rangle = (1 - e^{\beta\omega_q})^{-1} \quad \left(\beta = \frac{1}{\theta}\right)$$

такие же, как и при отсутствии электронов. Тогда произведем расцепление функций Грина, спаривая операторы b_q, относящиеся к одному времени

$$\left.\begin{aligned} &\langle\langle a_{p_1}^+ (b_{q_1} + b_{-q_1}^+) b_q a_{p_2};\ a_{g_2}^+(t')\, a_{g_1}(t')\rangle\rangle = \nu_q G_{p_1 p_2;\, g_2 g_1} \delta_{q+q_1}, \\ &\langle\langle a_{p_1}^+ b_q (b_{q_1} + b_{-q_1}^+) a_{p_2};\ a_{g_2}^+(t')\, a_{g_1}(t')\rangle\rangle = (1+\nu_q) G_{p_1 p_2;\, g_2 g_1} \delta_{q+q_1}. \end{aligned}\right\} \quad (8{,}31)$$

Уравнения (8,30б), (8,30в) принимают вид:

$$\{E + T_{p_1} - T_{p_2} - \omega_q\} G_{p_1 q p_2;\, g_2 g_1}(E) = \frac{1}{2\pi} \{\langle a_{p_1}^+ b_q a_{g_2}\rangle \delta_{p_2 - g_2} - \langle a_{g_2}^+ b_q a_{p_2}\rangle \delta_{g_1 - p_1}\} +$$
$$+ A_q \{(1+\nu_q) G_{p_1 p_2 + q;\, g_2 g_1}(E) - \nu_q G_{p_1 - q,\, p_2;\, g_2 g_1}(E)\}, \quad (8{,}32)$$
$$\{E + T_{p_1} - T_{p_2} + \omega_q\} G^1_{p_1 q p_2;\, g_2 g_1}(E) = \frac{1}{2\pi} \{\langle a_{p_1}^+ b_{-q}^+ a_{g_2}\rangle \delta_{p_2 - g_2} -$$
$$- \langle a_{g_2}^+ b_{-q}^+ a_{p_2}\rangle \delta_{g_1 - p_1}\} + A_q \{\nu_q G_{p_1, p_2 + q;\, g_2 g_1}(E) - (1+\nu_q) G_{p_1 - q,\, p_2;\, g_2 g_1}(E)\},$$

где перешли к фурье-компонентам функций Грина. Средние значения от произведения трех операторов типа $\langle a_p^+ b_q a_g\rangle$ можно легко вычислить, если учесть, что

$$\frac{d}{dt} \langle a_p^+(t)\, b_q(t)\, a_g(t)\rangle = 0,$$

и раскрыть это соотношение с помощью уравнений движения (8,3) в том же приближении, как и (8,34) с учетом (8,28). Тогда получим:

$$\left.\begin{aligned} \langle a_{p_1}^+ b_q a_{g_1}\rangle &= \frac{A_g \{\nu_q n_{g_1} - (\nu_q + 1) n_{p_1}\}}{T_{g_1} - T_{p_1} + \omega_q} \delta_{p_1 - g_1 - q}, \\ \langle a_{p_1}^+ b_{-q}^+ a_{g_1}\rangle &= \frac{A_g \{(1+\nu_q) n_{g_1} - \nu_q n_{p_1}\}}{T_{g_1} - T_{p_1} - \omega_q} \delta_{p_1 - g_1 - q}. \end{aligned}\right\} \quad (8{,}33)$$

Эти выражения содержат, кроме A_q, который предполагается малым, еще множитель n_p, и поэтому в нашем случае малой плотности электронов эти члены малы, так что в уравнении (8,32) в первом приближении двумя первыми слагаемыми можно пренебречь. Переходя в уравнении (8,30а) к фурье-компонентам и подставляя в него выражения (8,32), с учетом сделанных пренебрежений, получим интегральное уравнение для функции $G_{p_1 p_2;\, g_2 g_1}(E)$:

$$\{E + T_{p_1} - T_{p_2}\} G_{p_1 p_2;\, g_2 g_1}(E) + \sum_q A_q^2 \left\{ \frac{1+\nu_q}{E + T_{p_1} - T_{p_2+q} - \omega_q} + \right.$$
$$\left. + \frac{\nu_q}{E + T_{p_1} - T_{p_2+q} + \omega_q} + \frac{\nu_q}{E + T_{p_1+q} - T_{p_2} - \omega_q} + \frac{1+\nu_q}{E + T_{p_1+q} - T_{p_2} + \omega_q} \right\} G_{p_1 p_2;\, g_2 g_1} -$$
$$- \sum_q A_q^2 \left\{ \frac{\nu_q}{E + T_{p_1} - T_{p_2+q} - \omega_q} + \frac{1+\nu_q}{E + T_{p_1} - T_{p_2+q} + \omega_q} + \frac{1+\nu_q}{E + T_{p_1+q} - T_{p_2} - \omega_q} + \right.$$
$$\left. + \frac{\nu_q}{E + T_{p_1+q} - T_{p_2} + \omega_q} \right\} G_{p_1+q,\, p_2+q;\, g_2 g_1} = \frac{1}{2\pi} (n_{p_1} - n_{p_2}) \delta_{p_2 - g_2} \delta_{p_1 - g_1}. \quad (8{,}34)$$

Легко учесть также члены (8,33), которые дадут в правой части уравнения (8,34) дополнительный член неоднородности более высокого порядка, чем выписанный.

Уравнение (8,34) при $E \to \pm i\varepsilon \to 0$ имеет форму кинетического уравнения *), в чем легко убедиться, если преобразовать подынтегральное выражение с помощью (3,29); при этом члены, соответствующие интегралам в смысле главного значения, взаимно компенсируются и останутся члены с δ-функциями, выражающие закон сохранения энергии при столкновении.

Предполагая, что решение уравнений типа (8,34) известно, можно из соотношения (4,26) вычислить тензор электропроводимости. Существенно отметить, что при этом мы не пользуемся кинетическим уравнением, которое может быть в данном случае неприменимо.

§ 9. ВЫВОДЫ

1. Двухвременные функции Грина (запаздывающие и опережающие) являются удобным средством для изучения систем из большого числа взаимодействующих частиц, что связано с возможностью их аналитического продолжения в комплексную плоскость. Функции Грина аналитичны во всей плоскости комплексной энергии, а на действительной оси имеют, вообще говоря, линию разреза (§ 3).

2. Функции Грина подчиняются системе зацепляющихся уравнений, в которые входят лишь двухвременные функции (§ 2). Спектральные теоремы (§ 3) позволяют формулировать граничные условия к этим уравнениям. Расцепление системы уравнений с помощью какой-либо апроксимации (см., например, §§ 6—8) позволяет получить полную систему уравнений для функций Грина, разрешив которую, можно вычислить термодинамические функции системы.

3. Функции Грина удобны также для изучения кинетики слабонеравновесных процессов. Кинетические коэффициенты выражаются через фурье-компоненты запаздывающих функций Грина, вычисленных по состоянию статистического равновесия (§ 4).

4. Рассмотренные примеры можно подразделить на три группы: идеальные системы (§ 5), модельные системы со взаимодействием (§ 6), реальные системы со взаимодействием (§§ 7—8).

Для идеальных систем (идеальный ферми- или бозе-газ) функции Грина имеют полюса на действительной оси. Спектр элементарных возбуждений совпадает с полюсами одночастичной функции Грина, затухание отсутствует, временные корреляционные функции осциллируют при $|t'-t| \to \infty$. Если считать, что в идеальном газе имеется бесконечно малое взаимодействие (что необходимо для возможности установления в нем статистического равновесия), то можно считать, что идеальный газ обладает бесконечно малым затуханием.

Для модельных систем со взаимодействием (§ 6) функции Грина имеют полюса на действительной оси. Спектр элементарных возбуждений (зависящий от температуры) совпадает с полюсами одночастичной функции Грина. Затухание отсутствует (точнее асимптотически мало при $V \to \infty$, $V/N = \mathrm{const}$). Временные корреляционные функции при $|t'-t| \to \infty$ осциллируют с асимптотически малым затуханием.

Для реальных систем со взаимодействием функции Грина имеют линию разреза вдоль действительной оси и лишь в первом приближении имеют полюса. Затухание имеет конечную величину. Если пренебречь затуханием, приближенные функции Грина будут иметь полюса, которые можно отождествить с энергией элементарных возбуждений (зависящей от температуры). Поэтому энергия элементарных возбуждений имеет определенный смысл лишь в пренебрежении затуханием. Временные кор-

*) Связь уравнения для парной функции распределения с кинетическим уравнением имеет место и для неидеального ферми-газа [11].

реляционные функции при $|t'-t| \to \infty$ осциллируют с конечным затуханием. Перечисленные свойства сведены в таблице.

Можно ожидать, что свойства функций Грина, проиллюстрированные нами на примерах, сохраняются и для других систем, изучаемых в статистической механике.

Свойства статистических систем

	Идеальные системы	Модельные системы	Реальные системы
Особенности функций Грина	Аналитичны в верхней и нижней полуплоскости энергии		
	Полюса на действительной оси энергии	Полюса на действительной оси энергии	Линия разреза вдоль действительной оси энергии
Спектр элементарных возбуждений	Совпадает с полюсами одночастичной функции Грина	Совпадает с полюсами одночастичной функции Грина, вообще говоря, зависит от температуры	В первом приближении совпадает с полюсами функций Грина. В высшем приближении полюса отсутствуют, спектр определен с точностью до затухания
Затухание	Отсутствует	Отсутствует (точнее, асимптотически мало)	Конечное затухание
Поведение временных корреляционных функций при $\lvert t'-t\rvert \to \infty$	Осциллируют	Осциллируют с асимптотически малым затуханием	Осциллируют с конечным затуханием

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. L. Van Hove, Physica **21**, 901 (1955); **22**, 343 (1956).
2. J. Goldstone, Proc. Roy. Soc. **A 239**, 267 (1957).
3. N. M. Hugenholtz, Physica **23**, 481, 533 (1957). (См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 3 (1958).)
4. F. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956). (См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 2 (1958).)
5. C. Bloch, De Dominicis, Nucl. Phys. **7**, 459 (1958). (См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 6 (1958).)
6. J. Schwinger, Proc. Nat. Acad. Sci, **37**, 452, 455 (1951). (См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 3 (1955).)
7. A. Klein, R. Prange, Phys. Rev. **112**, 994 (1958) (См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 3 (1959))
8. H. Lehman, Nuovo Cim. **11**, 342 (1954).
9. H. B. Callen, I. A. Welton, Phys. Rev. **83**, 34 (1951).
10. R. Kubo, J. Phys. Japan **12**, 570 (1957).
11. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ **31**, 522 (1956).

11a. В. Л. Бонч-Бруевич, ФММ **4**, 546 (1957); **6**, 590, 769 (1958); **7**, 174 (1958), ДАН СССР **124**, 1233 (1959).

12. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **34**, 262 (1958).
13. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **32**, 399 (1957).
14. В. М. Галицкий, А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **34**, 139 (1958); В. М. Галицкий, там же **34**, 151 (1958).
15. С Т. Беляев, ЖЭТФ **34**, 417, 433 (1958).
16. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).
17. Ш. М. Коган, ДАН СССР **126**, № 3 (1959).
18. P. C. Martin, J. Schwinger, Bull. Am. Phys. Soc., Ser. II, **3**, 222 (1958); Phys Rev. **115**, 1342 (1959).

19. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ДАН СССР **126**, 53 (1959).
20. T. Matsubara, Prog. Teor. Phys. **14**, 351 (1955).
21. Н. Н. Боголюбов, Лекції з квантової статистики, Киев, 1949; Н. Н. Боголюбов и К. П. Гуров, ЖЭТФ **17**, 614 (1947).
22. M. Born, H. S. Green, Proc. Roy. Soc. **A189**, 10(1946); **190**, 455 (1947); H. S. Green, там же **A189**, 103 (1947).
23. Н. Н. Боголюбов, А. С. Парасюк, ДАН СССР **109**, 717 (1956).
24. H. Nyquist, Phys. Rev. **32**, 110 (1928).
25. H. Nakano, Prog. Theor. Phys. **15**, 77 (1954); **17**, 145 (1957).
26. J. G. Kirkwood, J. Chem. **14**, 180 (1946).
27. R. Kubo, K. Tomita, J. Phys. Soc. Japan **9**, 888 (1954).
28. H. Mori, J. Phys. Soc. Japan **11**, 1029 (1956); Phys. Rev. **111**, 694 (1958).
29. R. Kubo, M. Jokota, S. Nakajiama, J. Phys. Soc. Japan **12**, 1203 (1957).
30. J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **106**, 162 (1957); 1175 (1957).
31. Н Н. Боголюбов, ЖЭТФ, **34**, 53 (1958), **7**, 794 (1958).
32. Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, ДАН СССР **117**, 788 (1957).
33. K. Ikeda, Prog. Theor. Phys. **19**, 646 (1958).
34. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **35**, 1538 (1958).
35. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. М. Халатников, ЖЭТФ **35**, 265 (1958).
36 Д Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, Доклад на V Всесоюзном совещании по физике низких температур, Тбилиси (1958); Научные доклады Высшей школы, сер. физ.-мат., № 2, 133 (1959).
37. Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, Новый метод в теории сверхпроводимости, Изд. АН СССР, 1958.
38. С. В. Тябликов, УМЖ **11**, 287 (1959).
39. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ЖЭТФ **19**, 256 (1949).
40. W. Opechowski, Physica IV, 181 (1937).
41. G. Heber, Z. s. Naturforsch **9a**, 91 (1954).
42. M. R. Schafroth, Proc. Phys. Soc **A**, **67**, 33 (1954).
43. F. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1230 (1956). (См. русский перевод «Проблемы современной физики», № 2, (1958).)
44. Пу Фу-чо, НДВШ, сер. физ.-мат., № 2, 141 (1959); ДАН СССР **130**, 1244 (1960); **131**, 546 (1960).
45. С. В. Тябликов, Т. Шиклош, Acta Phys. Hung (в печати).
46. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ 28, 121 (1955); **30**, 342 (1956); **31**, 254 (1956).
47. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **34**, 1438 (1958).
48. Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, М.—Л , 1946.
49. T. Hill, Statistical Mechanics, 1956.
50. H. Ezawa, J. Tomozawa, H. Umezawa, Nuovo Cim. **5**, 810 (1957).
51. Е. С. Фрадкин, ЖЭТФ **36**, 1286 (1959). ДАН СССР **125**, 311 (1959).
52. R. H. Krishnan, Phys. Rev. **112**, 1054 (1959).
53. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **36**, 900 (1959).
54. Чень Чунь-сянь, ДАН СССР **125**, 1238 (1959).
55. L. Van Hove, Phys. Rev. **95**, 249, 1374 (1954).
56. В. В. Толмачев, ДАН СССР **112**, 842 (1957); **113**, 301 (1957).
57. Ю. Л. Климантович, ЖЭТФ **34**, 173 (1958).
58. Л. Э. Гуревич, Основы физической кинетики, Гостехиздат, М.—Л., 1940.
59. R. E. Peirls, Quantum theory of solids, Oxford, 1955. (Русский перевод Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956.)
60. W. Kohn, J. M. Luttinger, Phys. Rev. **108**, 590 (1957).
61. L. Van Hove, Physica **21**, 517 (1956); там же **23**, 441 (1957).
62. N. M. Hugenholtz, D. Pines (Препринт) (1959).
63. Н. Н. Боголюбов, К вопросу о модельном гамильтониане в теории сверхпроводимости, препринт (1960).
64. Д. Н. Зубарев, ДАН СССР **132**, № 5 (1960).
65. Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, ЖЭТФ **39**, № 7 (1960).
66. W. Montroll, J. Ward, Phys. Fluids **1**, 55 (1958).
67. А. А. Веденов, А. И. Ларкин, ЖЭТФ **36**, 1133 (1959).
68. А. А. Веденов, ЖЭТФ **36**, 641 (1959).
69. D. Falk, Phys. Rev. **115**, 1074 (1959).
70 G. Wentzel, Helv. Phys. Acta (1960) (в печати).