

Бонч-Бруевич

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ, С. В. ТЯБЛИКОВ

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

С предисловием
акад. Н. Н. БОГОЛЮБОВА



ГОСУДАРСТВЕННОЕ ИЗДАТЕЛЬСТВО
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1961

АННОТАЦИЯ

Книга посвящена систематическому изложению нового метода решения задачи многих тел, интенсивно развивающегося в последние годы как в СССР, так и за границей. Этот метод — так называемый метод температурных квантовых функций Грина — представляет собой синтез некоторых идей статистической физики и квантовой теории поля. Он позволяет единым образом рассматривать как равновесные, так и неравновесные процессы и удобен как для исследования общих свойств систем многих тел, так и для приближенного решения ряда конкретных задач.

Книга рассчитана на научных работников, аспирантов и студентов-теоретиков старших курсов.

*Бонч-Бруевич Виктор Леопольдович,
Тябликов Сергей Владимирович.*

Метод функций Грина в статистической механике.

Редактор А. А. Гусев.

Техн. редактор К. Ф. Брудно.

Корректор З. В. Автонева

Сдано в набор 25/X 1960 г. Подписано к печати 3/VII 1961 г. Бумага 84×108/32.

Физ. печ. л. 9,75. Услови. печ. л. 15,99. Уч.-изд. л. 15,8. Тираж 9500 экз.

T-01598. Цена книги 94 коп. Заказ № 2126.

Государственное издательство физико-математической литературы.
Москва, В-71, Ленинский проспект, 15.

Типография № 2 им. Евг. Соколовой УПП Ленсовнархоза.
Ленинград, Измайловский пр., 29.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
От авторов	9
Введение	11
Глава I. Основные соотношения	18
§ 1. Статистический оператор и временные корреляционные функции	18
§ 2. Спектральное представление простого произведения	23
§ 3. Функции Грина и их спектральные представления	29
§ 4. Диагональные элементы функций Грина. Дисперсионные соотношения	34
§ 5. Простейшие функции Грина	37
а) Однофермионная функция Грина	38
б) Однобозонная функция Грина	46
в) Двухчастичная функция Грина при попарно совпадающих аргументах	47
г) Однофотонная функция Грина	48
Глава II. Уравнения для функций Грина	53
§ 6. Уравнения движения и гамильтонианы	53
а) Заряженные частицы в электромагнитном поле	55
б) Электроны в фононном поле	56
в) Спиновая система в ферромагнетике	58
§ 7. Цепочки уравнений для двухвременных функций Грина	59
§ 8. Уравнения в функциональных производных	68
§ 9. Массовый и поляризационный операторы. Эффективное волновое уравнение	76
§ 10. Уравнения Дайсона и группа мультипликативной перенормировки	91
§ 11. Улучшенная теория возмущений	94
Глава III. Функции Грина и макроскопические характеристики системы	112
§ 12. Функции Грина и термодинамический потенциал	112
а) Взаимодействие через квантовое поле	112
б) Прямое взаимодействие между частицами	118
§ 13. Корреляционные функции	126

§ 14. Реакция системы на внешние воздействия. Представление через двухвременную функцию Грина . . .	135
§ 15. Реакция системы на внешние воздействия. Представление через вершинную часть	145
§ 16. Квазичастицы	153
Глава IV. Плазменные колебания в твердом теле	157
§ 17. Постановка задачи	157
§ 18. Частоты и затухание плазменных колебаний	160
§ 19. Плазменный спектр электронного газа; случай Ферми	173
§ 20. Плазменный спектр электронного газа; случай Больцмана	178
§ 21. Экранирование статического поля свободными зарядами	185
§ 22. Случай вырожденных зон	191
Глава V. Носители тока в твердом теле	195
§ 23. Идеальный полупроводник	195
§ 24. Неидеальный металл	201
§ 25. Мелкие локальные уровни в полупроводниках . . .	207
§ 26. Константа взаимодействия электронов с фононами в металле	211
Глава VI. Взаимодействие электронов с фононами	215
§ 27. Теория возмущений	215
§ 28. Энергетический спектр сверхпроводника	223
Глава VII. Ферромагнетизм	232
§ 29. Спиновые волны при конечных температурах	232
§ 30. Намагниченность в различных интервалах температуры	237
§ 31. Ферромагнитный резонанс	243
а) Неограниченная среда	246
б) Образец эллипсоидальной формы	247
§ 32. Общие соотношения для ферромагнитного резонанса	251
ПРИЛОЖЕНИЯ	
I. Некоторые сведения из квантовой теории поля	261
а) Представление взаимодействия и матрица рассеяния	261
б) Теория возмущений для S' -матрицы. Теорема Вика	266
в) Диаграммы Фейнмана	271
г) Правила перестановки при совпадающих временах	279

д) Однородная диэлектрическая и магнитная среда	280
е) Взаимодействие через поле и прямое взаимодействие	282
II. Операторы Паули	289
III. Причинная функция Грина для свободного электромагнитного поля	291
IV. Спектральные представления многовременных функций Грина	293
V. Уравнение Бете — Сальпетера	297
VI. Массовый оператор и вершинная часть для систем с прямым взаимодействием	302
Литература	306

ПРЕДИСЛОВИЕ

Основной задачей квантовой статистической механики, как и классической, является проблема многих тел. По существу она сводится к разработке эффективных методов расчета равновесных и неравновесных характеристик системы, состоящей из чрезвычайно большого числа частиц. За последние годы наметился ряд новых перспективных подходов к этой проблеме, связанных с систематическим использованием аппарата теории квантованных полей. Среди них одним из наиболее эффективных является, по-видимому, метод временных температурных функций Грина, представляющий собой естественное развитие аппарата, разработанного первоначально в связи с задачами квантовой электродинамики и мезодинамики. Уже использование «динамических» функций Грина, определенных как средние по основному состоянию системы, оказалось весьма эффективным при решении некоторых задач статистической физики. Однако только обобщение на случай конечных температур, представляющее собой соединение идей квантовой теории поля и метода матрицы плотности, позволило выявить все возможности данного аппарата.

Логика развития статистической механики за последние годы привела к тому, что метод температурных функций Грина начал развиваться одновременно в ряде мест как в Советском Союзе, так и за рубежом. Развитие его шло весьма интенсивно и по многим направлениям. При этом наряду с изучением общих вопросов широкое распростра-

нение получило применение метода к решению конкретных задач.

В настоящей монографии излагаются основы метода функций Грина и его приложения. Книга не охватывает всего материала ввиду его обширности и в значительной мере основывается на собственных исследованиях авторов. Она представляет собой первую попытку систематического изложения этого круга вопросов и некоторых приложений к теории плазмы, ферромагнетизма, сверхпроводимости и смежным проблемам.

Можно надеяться, что монография окажется полезной для лиц, желающих овладеть методом функций Грина и изучить отдельные конкретные результаты.

Академик Н. Н. Боголюбов

ОТ АВТОРОВ

Настоящая монография посвящена новому методу решения задачи многих тел — так называемому методу квантовых функций Грина. Этому методу в последние годы было посвящено довольно большое число работ. Мы не ставим своей целью охватить их все — монография основана, в значительной мере, на исследованиях авторов. Списки литературы к отдельным главам ни в коей мере не претендуют на полноту — цитируются в основном лишь работы, фактически использованные в тексте. Упор делается на изложение общей методики. Ей посвящены гл. I—III, содержащие общую спектральную теорию нерелятивистских температурных функций Грина, зависящих от двух моментов времени. Здесь же устанавливается связь функций Грина с термодинамическими и кинетическими характеристиками системы.

Главы IV—VII посвящены иллюстрациям развитого метода и приложениям его к различным вопросам физики конденсированной среды (теории электронной плазмы в твердом теле, взаимодействию электронов с фононами, теории ферромагнетизма при конечных температурах). Ряд содержащихся там результатов получен впервые, и мы надеемся, что они могут представить и самостоятельный интерес. В приложения вынесены некоторые сведения, знакомство с которыми желательно для понимания книги, но заранее не предполагается.

Книга рассчитана на лиц, знакомых с основами квантовой механики и статистической физики, в частности — с

методами матрицы плотности и вторичного квантования. Некоторые результаты квантовой теории поля, используемые в книге, формулируются в приложениях.

Авторы выражают глубокую признательность своему учителю академику Н. Н. Боголюбову за указание на перспективность метода функций Грина в задачах статистической механики и за многочисленные обсуждения возникающих в связи с этим проблем. Постоянное внимание Н. Н. Боголюбова к данной работе оказало нам неоценимую помощь.

Б. В. Медведев любезно просмотрел приложения I и III и сделал ряд весьма ценных замечаний, за что авторы искренне ему благодарны.

Авторы весьма признательны Ш. М. Когану и В. А. Москаленко, прочитавшим рукопись и сделавшим ряд полезных редакционных замечаний, а также Ю. В. Гуляеву и А. Г. Миронову за тщательный просмотр первых трех глав рукописи.

Авторы выражают искреннюю благодарность А. А. Гусеву, который внимательно прочитал рукопись и внес в нее ряд улучшений.

Москва,
16 декабря 1959 г.

Авторы

ВВЕДЕНИЕ

Метод квантовых функций Грина представляет собой объединение наиболее эффективных технических приемов современной квантовой теории поля [1] с идеей о последовательности «частичных» функций распределения, сравнительно давно уже используемой в статистической физике [2]. Такая комбинация, по-видимому, наилучшим образом приспособлена для разрешения принципиальных трудностей, возникающих при попытке динамического рассмотрения системы многих тел в статистической физике¹⁾. Трудности, о которых здесь идет речь, специфичны не для той или иной конкретной физической системы, а для всего этого класса задач вообще. Они связаны с наиболее характерной особенностью статистических систем — макроскопически большим числом степеней свободы²⁾. Макроскопически большие размеры системы приводят к тому, что полная энергия ее (как в основном, так и в возбужденном состоянии) оказывается пропорциональной общему объему V . В то же время разности между различными энергетическими уровнями системы (в частности, значения «энергии возбуждения», представляющие собой разности между возбужденными и основным уровнями) от объема, как правило, зависят весьма слабо, а в пределе

¹⁾ Здесь и в дальнейшем мы имеем в виду, естественно, задачу многих тел с учетом взаимодействия между ними. В тривиальном случае идеального газа обсуждаемые здесь трудности не возникают, ибо динамическая задача решается точно.

²⁾ В этом обстоятельстве лежит одна из причин глубокого математического родства задач статистической физики и квантовой теории поля. Действительно, последняя всегда имеет дело с системами с бесконечным числом степеней свободы. В этом смысле любая задача релятивистской квантовой теории поля есть задача многих тел.

при $V \rightarrow \infty$ не зависят вообще¹⁾. В большинстве задач физики конденсированной среды интересно именно асимптотическое исследование энергий возбуждения в пределе при $V \rightarrow \infty$. В этих условиях, очевидно, весьма рискованно пытаться определять энергии возбуждения, просто составляя разности двух больших (асимптотически при $V \rightarrow \infty$ неограниченно возрастающих) величин. Отсюда вытекает требование, которому должен удовлетворять любой метод решения задачи многих тел в статистической физике: спектр энергий возбуждения должен определяться непосредственно из некоторой задачи на собственные значения, условия которой асимптотически (при $V \rightarrow \infty$) не зависели бы от объема системы. Мы увидим (§§ 4, 5), что использование спектральных свойств функций Грина автоматически обеспечивает выполнение этого требования, и в этом состоит первое достоинство излагаемой ниже методики.

Далее, пропорциональность полной энергии, термодинамического потенциала и т. д. полному объему системы делает возможным введение соответствующих удельных величин, асимптотически не зависящих от объема. Обычно именно последние и представляют наибольший интерес, и расчет их составляет одну из важных задач теории. Математически это сводится к вычислению отношения опять-таки двух неограниченно возрастающих величин. При попытке прямого решения задачи это может привести к известным осложнениям. Соответственно возникает еще одно требование, предъявляемое к любой методике решения статистической задачи многих тел: метод должен обеспечивать четкое разделение экстенсивных и интенсивных величин. Подчеркнем, что это — далеко не тривиальная задача. Хорошо известно, например, что при попытке непосредственного вычисления энергии основного состояния с помощью стандартной квантовой механической теории возмущений могут появиться члены, содержащие «не физические» высшие степени объема. Хотя заранее очевидно, что в сумме такие члены должны взаимно скомпенсироваться, доказать это оказалось далеко не просто.

¹⁾ Этот предельный переход здесь и в дальнейшем понимается в обычном смысле: $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ (N — число частиц) при $\frac{N}{V} = n = \text{const}$.

К тому же наличие членов, зависящих от сколь угодно высоких степеней объема, приводит к исключительно плохой сходимости ряда (если он вообще сходится). В связи с этим Ван Ховом [3] и Гугенгольцем [4] была разработана специальная форма теории возмущений, обеспечивающая выделение слагаемых, содержащих степени V , в особую группу. Мы увидим (§ 12), что в методе функций Грина разделение интенсивных и экстенсивных величин получается само собой и в этом — другое его достоинство.

Важной особенностью систем многих частиц является возможность возникновения в них возбужденных состояний особого типа, обязанных взаимодействию между частицами и потому не имеющих себе аналога в случае идеального газа (классический пример таких возбужденных состояний представляют плазменные колебания электронов в газовом разряде или в твердом теле). Поскольку взаимодействие вызывает здесь не просто поправки к энергиям свободных частиц, а состояния принципиально новой природы, важной задачей теории является создание регулярного аппарата, позволяющего следить за возникновением новых ветвей энергетического спектра¹⁾. В §§ 4, 5 и 11 будет показано, что использование спектральных свойств функций Грина решает и эту задачу и в этом — третье достоинство данной методики.

С вопросом о различных ветвях энергетического спектра тесно связано представление об элементарных возбуждениях системы — «квазичастицах», идеальный газ которых в известном смысле имитирует поведение свободных частиц и описывает слабо возбужденные состояния системы многих тел. Это представление, служа в течение последних двадцати лет основой теоретического рассмотрения целого ряда вопросов физики конденсированных сред, само до сих пор еще не имело достаточного общего обоснования. Метод функций Грина дает, по-видимому, окончательное решение этой задачи, выявляя вместе с тем и пределы применимости понятия об элементарных возбуждениях.

В этой связи отметим следующие обстоятельства.

¹⁾ Подчеркнем, что дело здесь не в силе или слабости взаимодействия, а в том, что в отсутствие его определенных ветвей энергетического спектра системы может не быть вообще.

Во-первых, представление о «квазиодночастичном» характере некоторых ветвей энергетического спектра системы многих тел возникает в теории без каких-либо предположений специального типа. Оно в общем виде вытекает из спектральных теорем §§ 3—5, касающихся связи особых точек функций Грина с величинами, определяющими эволюцию системы во времени. Эти теоремы справедливы при весьма общих предположениях, и поэтому данное обоснование идеи об элементарных возбуждениях не связано с какими-либо аппроксимациями и в указанном смысле является окончательным.

Во-вторых, из тех же спектральных теорем следует, что, вообще говоря, число квазичастиц не есть интеграл движения (волновые функции состояний с заданными числами квазичастиц, вообще говоря, не осциллируют, а затухают со временем).

Иначе говоря, идеальный газ квазичастиц описывает не истинно стационарные, а лишь квазистационарные состояния системы, и пользоваться этим представлением можно лишь при достаточно малом затухании — пока ширина уровня мала по сравнению с энергией возбуждения, отнесенной к одной частице. В этом смысле понятие об элементарных возбуждениях является приближенным, и метод расчета автоматически определяет пределы его применимости, ибо позволяет определять константы затухания. Следует, однако, подчеркнуть, что в статистической физике конденсированных сред фактически всегда работают именно с квазистационарными состояниями. Действительно, только в этом случае и имеют смысл такие понятия, как длина и время свободного пробега, длина диффузии и т. д. Причина этого состоит в невозможности (при наличии взаимодействия между частицами) полностью исключить обмен энергией, импульсом и т. д. между различными степенями свободы системы. Молчаливо допускаемое пренебрежение нестационарностью состояний при вычислении термодинамических величин есть не более чем аппроксимация, справедливая лишь в указанных выше условиях (малость затухания). Представление об элементарных возбуждениях с конечным временем жизни, естественно, ничего не меняет в этой ситуации, а лишь выражает ее наиболее четким образом.

Наконец, в-третьих, величины, именуемые энергиями квазичастиц, оказываются, вообще говоря, зависящими от

температуры (§ 16). Это обстоятельство не должно вызывать удивления, ибо спектр квазичастиц определяется через величины, характеризующие временную эволюцию смешанного ансамбля (с гиббсовым распределением вероятностей отдельных «чистых» состояний в начальный момент). Вопрос о «температурно зависящем энергетическом спектре» неоднократно дискутировался в литературе. В связи с этим мы хотели бы подчеркнуть, что прежде всего необходимо точно определить, какое именно содержание вкладывается в это понятие. Метод функций Грина, по-видимому, дает наиболее ясный ответ на поставленный вопрос.

Одной из наиболее важных и вместе с тем наиболее трудных задач статистической физики является исследование фазовых переходов. Мы увидим на конкретных примерах в гл. VI и VII, что метод функций Грина дает известную возможность подойти к решению и этого вопроса.

Важное достоинство метода функций Грина состоит, наконец, в том, что он позволяет единым образом решать задачи самого различного типа и притом как равновесные, так и кинетические. Последнее обстоятельство представляется нам особенно существенным. Хорошо известно, что в ряде задач теории твердого тела применение стандартной методики кинетического уравнения встречается с большими трудностями, как вычислительными (анизотропные системы), так и принципиальными (системы с малым временем свободного пробега и в сильном магнитном поле). Попыткам выхода за рамки метода кинетического уравнения в последние годы был посвящен целый ряд работ. В §§ 14 и 15 будет показано, что метод функций Грина дает, по-видимому, наиболее естественный формальный аппарат для решения кинетических задач.

Применение метода функций Грина к задачам нерелятивистской теории многих тел (при $T=0$) было впервые дано в 1954 г. в работе [5], выполненной по инициативе и по предложению Н. Н. Боголюбова. В дальнейшем развитии важную роль сыграли полученные в связи с задачами квантовой теории поля спектральные теоремы Челлена — Лемана [6, 7], перенос которых на случай нерелятивистской задачи многих тел [8] позволил в общем виде установить связь особых точек функций Грина с характеристиками энергетического спектра системы. В дальнейшем метод функций Грина

(в связи с различными статистическими задачами) развивался в работах ряда авторов [9—15]; во всех цитированных работах, однако, рассмотрение ограничивалось случаем $T=0$, что затрудняло возможность использования развитой методики для исследования термодинамических систем. Попытка создания аппарата, пригодного при отличной от нуля температуре, была впервые предпринята Мацубара [16]; в названной работе, однако, рассматривались лишь функции Грина, не зависящие от времени, что не позволяло непосредственно применить их для изучения энергетического спектра системы. Полное обобщение метода на случай произвольной температуры было дано в работах [17—26].

Как правило, мы рассматриваем нерелятивистские задачи многих тел, явно выделяя временные координаты. Релятивистские обозначения и соотношения используются лишь при формулировке задачи о системе частиц с электромагнитным взаимодействием, поскольку это ведет к упрощению записи и облегчает некоторые доказательства. Однако даже и в этом случае имеется в виду последующее нерелятивистское приближение (для частиц).

Система обозначений, использованная в книге, в основном общепринятая. Символами $\bar{a}$, a обозначаются как фермиевские, так и бозевские операторы вторичного квантования, коль скоро квантуются поля с сохраняющимся числом частиц. Для операторов порождения и уничтожения фононного, электромагнитного и т. д. полей используются обозначения $\bar{\xi}$, ξ . Временные переменные обозначаются буквами x_0 , x'_0 , ... Буква x обозначает в зависимости от контекста либо совокупность $\{\lambda, x_0\}$, где λ — любые динамические переменные (λ — представление), либо — в частном случае — совокупность $\{x, x_0\}$, где x — тройка пространственных координат. Разложение в четырехмерный интеграл Фурье производится по правилу

$$f(x) = \int dk e^{-ikx} f(k), \quad f(k) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int dx e^{ikx} f(x).$$

Здесь $kx = k_0 x_0 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$, $dk = dk_0 d\mathbf{k}$, $dx = dx_0 d\mathbf{x}$.

Латинские векторные индексы всюду принимают значения 1, 2, 3, греческие — 0, 1, 2, 3. Метрический тензор $g_{\alpha\beta}$,

фигурирующий в релятивистских формулах, имеет вид

$$g_{\alpha\beta} = g^{\alpha\beta}, \quad g_{00} = -g_{11} = -g_{22} = -g_{33} = 1; \\ g_{\alpha\beta} = 0 \quad \text{при} \quad \alpha \neq \beta.$$

Коммутаторы и антикоммутаторы обозначаются соответственно символами $[\dots]_-$ и $[\dots]_+$.

Символ Sp_{11} обозначает диагональную сумму по переменным вторичного квантования от элементов стоящей под знаком Sp_{11} матрицы, символ же Sp означает диагональную сумму только по спиновым индексам. Всюду, где особо не оговорено противное, подразумевается суммирование по повторяющимся спинорным и тензорным индексам.

Заряды и токи всегда считаются алгебраическими.

Мы пользуемся системой единиц Хивисайда, полагая, кроме того, $\hbar = 1$. Однако окончательные формулы в главах IV—VII выписываются и в обычной гауссовой системе.

ГЛАВА I

ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

§ 1. Статистический оператор и временные корреляционные функции

Произвольная квантовомеханическая система с максимально возможной полнотой описывается с помощью статистического оператора ρ . Матричные элементы оператора ρ ¹⁾ (см. [1], [2]) можно записать в виде

$$(\lambda|\rho|\lambda') = \sum_n W_n \Phi_n(\lambda_1, \dots, \lambda_N, t) \bar{\Phi}_n(\lambda'_1, \dots, \lambda'_N, t). \quad (1.1)$$

Здесь N — число частиц в системе, $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ — переменные, от которых зависят собственные функции Φ_n оператора полной энергии [например, в системе N частиц это может быть совокупность $3N$ пространственных координат (или $3N$ компонент импульсов) и N спиновых индексов], n — номер состояния, описываемого функцией Φ_n ; $0 \leq W_n \leq 1$ (число W_n обычно интерпретируется как вероятность осуществления n -го состояния), t — время.

Зная явное выражение для статистического оператора, в принципе можно вычислить среднее значение $\tilde{F}$ любой динамической переменной F по формуле

$$\tilde{F} = \text{Sp} \rho F \equiv \langle F \rangle. \quad (1.2)$$

Усреднение здесь (как и всюду в дальнейшем) понимается как в чисто квантовомеханическом, так и в статистическом смысле. В частности, когда система находится в состоянии

¹⁾ Матрицу, соответствующую оператору ρ (и даже сам оператор ρ), часто называют также матрицей плотности.

статистического равновесия и температура T стремится к нулю, правая часть (1.2) переходит в обычную формулу для квантовомеханического среднего значения. Уравнение для ρ , как известно [1], имеет вид

$$i \frac{\partial \rho}{\partial t} = H\rho - \rho H, \quad (1.3)$$

где H — полный гамильтониан системы. Мы не обсуждаем здесь в деталях вопроса о граничных условиях к уравнению (1.3), ибо решение его не входит в наши задачи. Напомним лишь, что для большого ансамбля Гиббса в условиях статистического равновесия ρ дается выражением

$$\rho = Ce^{-\beta H + \beta \mu N}, \quad (1.4)$$

где $\beta = \frac{1}{kT}$, μ — химический потенциал, отнесенный к одной частице, N — оператор полного числа частиц в системе, C — нормировочная постоянная, обычно записываемая в виде

$$C = e^{\beta \Omega}.$$

Величина Ω представляет собой термодинамический потенциал в переменных μ и T и определяется условием нормировки

$$\text{Spur } \rho = 1. \quad (1.5)$$

На основании (1.5) и (1.4) мы имеем

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Spur } e^{-\beta H + \beta \mu N}. \quad (1.6)$$

При рассмотрении систем тождественных частиц следует считать, что операторы H и N в (1.4) действуют лишь в пространстве функций должной симметрии — симметричных или антисимметричных относительно перестановок своих аргументов — в зависимости от типа статистики, которой подчиняются частицы рассматриваемой системы. Об этом обстоятельстве мы будем говорить как о симметрии оператора ρ .

Подчеркнем, что использование именно большого ансамбля Гиббса для нас весьма существенно, ибо в дальнейшем неоднократно придется работать с операторами, не сохраняющими число частиц. По этой причине нам удобно будет ввести «обобщенный гамильтониан»

$$H' = H - \mu N. \quad (1.7)$$

Величина μ входит сюда как параметр, определяемый из условия постоянства частиц в системе. Говоря в дальнейшем о стационарных состояниях системы, мы будем иметь в виду собственные значения и собственные функции оператора (1.7).

Равенства (1.1) — (1.6) содержат в себе, в сущности, всю термодинамику и всю кинетику любой системы. Однако непосредственное использование их (если исключить мало интересный случай идеального газа) сопряжено с необычайными трудностями. Во-первых, уравнение (1.3) (в нестационарном случае) решить обычно не проще, чем уравнение Шредингера для системы многих частиц. Во-вторых, задачу не меньшей трудности может составить и само вычисление шпура (1.2) даже при известной матрице плотности.

К счастью, однако, для решения подавляющего большинства задач полная информация, содержащаяся в матрице плотности, фактически не нужна [2], [3]. Действительно, чаще всего приходится иметь дело лишь с операторами аддитивного и бинарного типов. При вычислении средних значений динамических переменных, описываемых этими операторами, общая формула (1.2) значительно упрощается. Рассмотрим, например, среднее значение $\tilde{A}$ некоторого аддитивного оператора A . В силу симметрии оператора ρ мы имеем

$$\tilde{A} = \text{Spur } A\rho_1, \quad (1.8)$$

где оператор ρ_1 получается в результате взятия шпура от ρN по всем переменным $\lambda_1, \dots, \lambda_N, \lambda'_1, \dots, \lambda'_N$, кроме одной пары их. Как показано в [2], ρ_1 удобно записать в схеме вторичного квантования. Именно, перейдем к представлению вторичного квантования с помощью некоторой полной ортонормированной системы функций, зависящих каждая от переменных λ одной частицы (как всегда в методе вторичного квантования, эти «одночастичные» состояния могут не иметь ничего общего с фактическими состояниями системы). Обозначим через $\bar{a}(\lambda)$ и $a(\lambda)$ обычные операторы порождения и уничтожения частиц в состоянии с данным значением λ (фермиевские, или бозевские, или операторы Паули¹⁾ в зависимости от природы задачи). Тогда [2] матричные элементы

¹⁾ См. приложение II.

оператора ρ_1 даются выражением

$$(\lambda | \rho_1 | \lambda') = \langle \bar{a}(\lambda') a(\lambda) \rangle. \quad (1.9)$$

Операторы $\bar{a}$, a здесь берутся в представлении Шредингера. Можно перейти и к представлению Гейзенберга, включив в число аргументов $\bar{a}$, a еще и время t (одно и то же для обоих операторов). В дальнейшем мы, как правило, будем пользоваться именно представлением Гейзенберга (сохраняя те же обозначения).

Будем называть ρ_1 «одночастичным» (или первым) статистическим оператором. Во избежание недоразумений подчеркнем, что термин «одночастичный» отнюдь не следует понимать в смысле какого бы то ни было пренебрежения взаимодействием между частицами. Он означает лишь число аргументов, от которых зависит ρ_1 . Для вычисления среднего значения любого аддитивного оператора достаточно знать оператор ρ_1 . Совершенно аналогично среднее значение любого бинарного оператора B дается формулой

$$\tilde{B} = \frac{1}{2} \text{Spur } B \rho_2. \quad (1.10)$$

Матричные элементы оператора ρ_2 даются выражением

$$(\lambda_1, \lambda_2 | \rho_2 | \lambda'_2, \lambda'_1) = \langle \bar{a}(\lambda'_1) \bar{a}(\lambda'_2) a(\lambda_2) a(\lambda_1) \rangle. \quad (1.11)$$

Будем называть ρ_2 «двухчастичным» (вторым, бинарным) статистическим оператором.

В полной аналогии с (1.9) и (1.10) можно ввести « s -частичные» статистические операторы с матричными элементами

$$(\lambda_1, \dots, \lambda_s | \rho_s | \lambda'_s, \dots, \lambda'_1) = \langle \bar{a}(\lambda'_1) \dots \bar{a}(\lambda'_s) a(\lambda_s) \dots a(\lambda_1) \rangle. \quad (1.12)$$

единственно необходимые для вычисления средних значений s -частичных операторов. При конечном s и $V \rightarrow \infty$ операторы ρ_s асимптотически не зависят от V [2].

Фактически для решения большинства задач статистической физики достаточно знать только операторы ρ_1 и ρ_2 , а отнюдь не весь статистический оператор ρ . Естественно возникает вопрос: нельзя ли определять ρ_1 и ρ_2 непосредственно, не вычисляя предварительно полный статистический оператор ρ (т. е., в частности, не решая уравнения Шредингера для системы многих взаимодействующих частиц)?

Можно надеяться, что — хотя бы в силу меньшего числа аргументов у искоемых функций — эта задача окажется значительно более простой, чем попытка непосредственного вычисления ρ . Именно так и была поставлена задача в работах [2, 3], где была получена система уравнений для функций $\rho_1, \rho_2, \dots$. Следует заметить, что благодаря наличию взаимодействия между частицами эта система представляет собой, вообще говоря, бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений, включающую матрицы ρ_s все более и более высоких порядков. Именно в необходимости какого-то «расщепления» этой цепочки и состоит основная трудность задачи; в этом пункте обычно и приходится вводить различные аппроксимации.

Заметим, что наряду с ρ_1, ρ_2 существенный интерес представляют также функции, зависящие от двух времен, называемые временными корреляционными функциями, например

$$\begin{aligned} &(\lambda_1, \dots, \lambda_s | \rho_s(t, t') | \lambda'_s, \dots, \lambda'_1) = \\ &= \langle \bar{a}(\lambda'_1, t') \dots \bar{a}(\lambda'_s, t') a(\lambda_s, t) \dots a(\lambda_1, t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.13)$$

При $t' \rightarrow t$ (1.13) переходит в (1.12). «Двухвременные» средние типа (1.13) играют важную роль в кинетических задачах, ибо описывают эволюцию системы во времени. Действительно, рассмотрим сначала случай $T=0$. Тогда правая часть (1.13) превращается в квантовомеханическое среднее по основному состоянию системы

$$(\Phi_0, \bar{a}(\lambda_1, t') \dots \bar{a}(\lambda'_s, t') a(\lambda_s, t) \dots a(\lambda_1, t) \Phi_0), \quad (1.14)$$

где Φ_0 — волновая функция основного состояния. Очевидно, при $t < t'$ величину (1.14) можно (с точностью до множителя) интерпретировать как амплитуду вероятности обнаружить в момент t' состояние $a(\lambda'_s, t') \dots a(\lambda'_1, t') \Phi_0$, если в момент t мы имели состояние $a(\lambda_s, t) \dots a(\lambda_1, t) \Phi_0$ (поскольку названные состояния, вообще говоря, не стационарны, эта величина убывает по модулю при $t' - t \rightarrow \infty$). При конечной температуре ($T \neq 0$) совокупность величин (1.13) описывает эволюцию смешанного ансамбля Гиббса.

Можно ввести, конечно, и «многовременные» корреляционные функции, в которых каждому оператору $a, \bar{a}$ приписывается свое время, но это нам пока не понадобится.

Заметим также, что часто встречаются средние и от других комбинаций операторов, например выражения вида

$$(\bar{a}(\lambda'_1, t') a(\lambda_1, t') \bar{a}(\lambda'_2, t) a(\lambda_2, t))$$

(см. §§ 5, 12). Как мы увидим в дальнейшем, величины именно такого типа определяют, например, коэффициенты переноса (электропроводность и т. д.).

Для краткости обозначим через $C_1(x)$ и $C_2(x')$ любые произведения операторов $a, \bar{a}$; при этом x есть совокупность времени ($t \equiv x_0$) и каких-то переменных λ ; в частности, λ может обозначать обычную тройку координат (x) или компонент вектора импульса (p). Равным образом, x' есть совокупность времени ($t' \equiv x'_0 \neq x_0$, вообще говоря) и переменных λ' (той же природы, что и λ). В соответствии со сказанным выше наша задача будет состоять в исследовании величин

$$K(x, x') = \langle C_1(x) C_2(x') \rangle. \quad (1.15)$$

Отметим важный частный случай, когда $C_2 = \bar{C}_1$, $x_0 > x'_0$ и $T = 0$. При этом правая часть (1.15) представляет собой (с точностью до множителя) амплитуду вероятности обнаружить в момент x_0 состояние $\bar{C}_1(x) \Phi_0$, если в момент x'_0 система находилась в состоянии $\bar{C}_1(x') \Phi_0$. В частности, при $\lambda' = \lambda$ функция $K(\lambda, x_0; \lambda, x'_0)$ описывает временную эволюцию состояния $\bar{C}_1(\lambda, x_0) \Phi_0$. При $T \neq 0$, как и раньше, следует говорить об эволюции смешанного ансамбля.

В дальнейшем мы будем интересоваться лишь случаем статистического равновесия, когда оператор ρ дается выражением (1.4).

§ 2. Спектральное представление простого произведения

Очевидно, в состоянии статистического равновесия $K(x, x')$ может зависеть лишь от разности времен $x_0 - x'_0 = t$, в силу чего возможно представление функции $K(x, x') = K(\lambda, \lambda'; t)$ в виде однократного интеграла Фурье. Эту форму записи K будем называть спектральным представлением. Мы увидим, что соответствующий фурье-образ обладает важными

свойствами, которые будут в дальнейшем широко использованы в конкретных приложениях.

Обозначим через Φ_n и E_n собственные функции и собственные значения обобщенного гамильтониана H' (1.7). Здесь n есть некоторая совокупность квантовых чисел, полностью определяющая состояние Φ_n . Введем обозначение

$$p_n = e^{\beta\Omega - \beta E_n}. \quad (2.1)$$

Тогда, используя полноту системы функций Φ_n , формулу (1.15) можно представить в виде

$$\begin{aligned} K(x, x') &= \sum_n p_n (\Phi_n, C_1(x) C_2(x') \Phi_n) = \\ &= \sum_{n, n'} p_n (\Phi_n, C_1(x) \Phi_{n'}) (\Phi_{n'}, C_2(x') \Phi_n). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Суммы здесь могут обозначать и интегралы по непрерывным переменным n . Заметим, что хотя в произведении $C_1 C_2$ интерес представляет лишь часть, сохраняющая число частиц (в противном случае усреднение в (1.15) дает нуль), операторы C_1 и C_2 в отдельности могут число частиц и не сохранять (так, например, обстоит дело в практически важном случае $C_1 = \bar{C}_2 = a(\lambda, t)$). Таким образом, представление (2.2) [равно как и вытекающее из него приведенное ниже выражение для спектральной функции (2.5)], вообще говоря, имеет смысл лишь для системы с переменным числом частиц. По этой причине мы и пользуемся усреднением по большому ансамблю Гиббса.

Воспользуемся теперь уравнениями движения для операторов C_1 и C_2 :

$$\frac{\partial C_j}{\partial x_0} = i(H' C_j - C_j H'), \quad j = 1, 2. \quad (2.3)$$

В силу (2.3)

$$\begin{aligned} (\Phi_n, C_1(x) \Phi_{n'}) &= (\Phi_n, C_1(\lambda, x_0 = 0) \Phi_{n'}) e^{+i(E_n - E_{n'})x_0}, \\ (\Phi_{n'}, C_2(x') \Phi_n) &= (\Phi_{n'}, C_2(\lambda', x'_0 = 0) \Phi_n) e^{-i(E_n - E_{n'})x'_0}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

Определим спектральную функцию $J(\lambda, \lambda'; E)$ с помощью равенства

$$J(\lambda, \lambda'; E) = \sum_{n, n'} p_n \delta(E - E_{n'} + E_n) (\Phi_n, C_1(\lambda, x_0 = 0) \Phi_{n'}) \times \\ \times (\Phi_{n'}, C_2(\lambda', x'_0 = 0) \Phi_n). \quad (2.5)$$

Тогда равенства (2.2) и (2.4) дают ($t = x_0 - x'_0$)

$$K(x, x') \equiv K(\lambda, \lambda'; t) = \langle C_1(x) C_2(x') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} J(\lambda, \lambda'; E) \quad (2.6)$$

и аналогично

$$K'(x, x') \equiv K'(\lambda, \lambda'; t) = \langle C_2(x') C_1(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt - \beta E} J(\lambda, \lambda'; E). \quad (2.7)$$

Полагая здесь $t = 0$, получаем выражения для средних по ансамблю

$$\langle C_1(\lambda, x_0) C_2(\lambda', x_0) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE J(\lambda, \lambda'; E), \\ \langle C_2(\lambda', x_0) C_1(\lambda, x_0) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\beta E} J(\lambda, \lambda'; E). \quad (2.8)$$

Формулы (2.6) — (2.8) сводят задачу о вычислении равновесных и кинетических характеристик системы к определению соответствующей спектральной функции. В конечном счете именно это обстоятельство обуславливает эффективность метода функций Грина, через которые, как мы увидим в следующих параграфах, спектральная функция выражается непосредственно.

Из формул (2.6) и (2.7) вытекает, что спектральные функции для произведений двух операторов, взятых в различном порядке ($C_1 C_2$ и $C_2 C_1$), отличаются друг от друга множителем $e^{-\beta E}$. Отсюда, в частности, следует, что для

коммутирующих или антикоммутирующих (при $x'_0 = x_0$) операторов имеет место тождество

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE J(\lambda, \lambda'; E) (1 \pm e^{-\beta E}) = 0 \quad (2.9)$$

(верхний знак для антикоммутирующих операторов, нижний — для коммутирующих). Легко установить также связь между спектральными функциями произведений, коммутатора и антикоммутатора двух операторов. Действительно, полагая

$$\langle [C_1(x), C_2(x')]_{\pm} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} J_{\pm}(\lambda, \lambda'; E)$$

и пользуясь равенствами (2.6) и (2.7), мы получаем

$$J_+(\lambda, \lambda'; E) = J_-(\lambda, \lambda'; E) \operatorname{cth} \frac{\beta E}{2} = (1 + e^{-\beta E}) J(\lambda, \lambda'; E). \quad (2.10)$$

Наконец, сравнивая (2.6) и (2.7), видим, что

$$K'(\lambda, \lambda'; t) = K(\lambda, \lambda'; t - i\beta). \quad (2.11)$$

Итак, исследование временных корреляций в системе сводится к изучению аналитических свойств спектральных функций (2.5). В частности, большой интерес представляют дельта-образные особенности $J(\lambda, \lambda'; E)$ на вещественной оси при $C_2 = \bar{C}_1$ и $\lambda' = \lambda$. Действительно, пусть соответствующие особые точки суть E_i . Очевидно, при наличии их функция $K(\lambda, \lambda'; t)$ при $t \rightarrow \infty$ осциллирует с частотами E_i ¹⁾. Из выражения для квантовомеханического среднего (1.14) (а также из определения спектральной функции (2.5)) ясно, что при $T = 0$ величины E_i представляют собой точные собственные значения энергии системы. При $T \neq 0$ величины E_i (если они вообще существуют) суть функции температуры и химического потенциала системы и потому не допускают чисто механического истолкования; из формул (2.6) и (2.7) видно,

¹⁾ Слова «частота» и «разность энергий», в силу принятой системы единиц ($\hbar = 1$), употребляются здесь и в дальнейшем на равных правах.

однако, что они характеризуют незатухающие движения в системе. Таким путем мы естественно приходим к определению понятия «энергетический спектр, зависящий от температуры», о котором говорилось во Введении. Как видно из выражения (2.5), значения E_i суть разности типа $E_n - E_{n'}$. Это означает, в частности, что при $T=0$ они представляют собой энергии возбуждения системы, вычисляемые независимо от энергии основного состояния (последнюю можно принять просто за нуль).

Таким образом, использование спектральных функций позволяет непосредственно определять энергетический спектр системы.

Во избежание недоразумений заметим следующее. При $T=0$ можно найти такой оператор C_1 (зависящий от n), что $\bar{C}_1\Phi_0 = \Phi_n$ и, следовательно, $J(\lambda, \lambda'; E)$ имеет дельтаобразную особенность (это есть просто определение оператора $\bar{C}_1$). Однако нахождение таких операторов эквивалентно точному решению уравнения Шредингера для рассматриваемой системы многих тел и практически невыполнимо (в сколь угодно интересных случаях). Можно лишь с уверенностью утверждать, что (используемые в дальнейшем) простые комбинации типа $C_1 = a$ или $C_1 = \bar{a}a$ указанным свойством отнюдь не обладают и соответствующие функции $K(x, x')$ не осциллируют, а затухают со временем. Соответственно и особенности спектральных функций $J(\lambda, \lambda'; E)$ имеют более сложный характер и, как правило, не сводятся просто к полюсам. При $T \neq 0$ положение усложняется. Действительно, в этом случае усреднение производится не по основному состоянию, а по смешанному ансамблю. Поэтому в правой части (2.5) должна фигурировать вся совокупность матричных элементов $(\Phi_n, \bar{C}_1\Phi_{n'})$ и функции $K(x, x')$ лишь в исключительных случаях могут оказаться осциллирующими. Например, так обстоит дело для идеальных бозе- и ферми-газов (в отсутствие внешнего поля) при $\bar{C}_1 = \bar{a}(p, s)$, где $\bar{a}(p, s)$ — оператор порождения частицы с заданным импульсом p и спином s . Действительно, состояния идеального газа свободно движущихся частиц полностью определяются заданием чисел заполнения $n(p, s)$ «одночастичных» состояний с данными импульсами и спинами. Индексы n, n' при этом обозначают всю совокупность чисел $n(p, s)$, а собственные функции Φ_n суть

произведения δ -функций вида

$$\Phi_{n'} = \prod_{p, s} \delta [n(p, s) - n_0(p, s)],$$

где n_0 — заданные числа. Очевидно, операторы a , $\bar{a}$ переводят $\Phi_{n'}$ в другую функцию такого же вида, т. е. выражения $a\Phi_{n'}$, $\bar{a}\Phi_{n'}$ также — при любом n' — являются собственными функциями H' . В общем случае, однако, всегда имеет место затухание. Причина этого состоит в том, что при наличии взаимодействия между частицами в системе с непрерывным (или почти непрерывным) энергетическим спектром всегда имеет место обмен энергией, импульсом и т. д. между различными степенями свободы. Математически наличие затухания проявляется в том, что полюсы спектральной функции смещаются с вещественной оси в комплексную плоскость; на вещественной же оси могут возникнуть особенности более сложной природы. В зависимости от конкретного вида операторов C_1 и C_2 в (1.15) полюсы, определяющие затухание, должны лежать либо в верхней, либо в нижней E -полуплоскости (см. § 5).

Таким образом, особенности спектральных функций лишь в исключительных случаях определяют истинно стационарные состояния системы. При достаточно малом затухании, однако, можно ввести представление о квазистационарных состояниях. Соответствующие величины (1.15) (при $t > 0$) имеют вид $e^{-i\omega t} f(t)$, где (вещественные) частоты ω связаны с особенностями функций $J(\lambda, \lambda'; E)$, а функция $f(t)$ описывает затухание [$f(t) \rightarrow 0$ при $|t| \rightarrow \infty$]. При этом параметры, определяющие «темп убывания» $f(t)$ («константы затухания»), должны быть малы по сравнению с частотами ω , отсчитанными от основного состояния системы (условие квазистационарности). Именно с такими квазистационарными состояниями и приходится чаще всего иметь дело в статистической физике (см. Введение).

Исследование аналитической структуры спектральных функций в принципе позволяет определить соответствующие частоты и константы затухания, обеспечивая и автоматическую проверку условия квазистационарности. В дальнейшем, говоря об энергетическом спектре системы (в частности, и при $T=0$), мы, как правило, будем иметь в виду именно квазистационарные состояния.

§ 3. Функции Грина и их спектральные представления¹⁾

Для исследования структуры спектральных функций типа (2.5) полезно иметь возможность выхода в комплексную E -плоскость. В этой связи представляется целесообразным ввести функции

$$K_r(x, x') = i \langle C_1(x) C_2(x') \rangle \theta(t) \equiv \langle \langle C_1(x) C_2(x') \rangle \rangle_r, \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} K_r^{(\pm)}(x, x') &= i \langle [C_1(x) C_2(x')]_{\pm} \rangle \theta(t) \equiv \\ &\equiv \langle \langle C_1(x) | C_2(x') \rangle \rangle_r^{(\pm)}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$K_a(x, x') = -i \langle C_1(x) C_2(x') \rangle \theta(-t) \equiv \langle \langle C_1(x) C_2(x') \rangle \rangle_a, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} K_a^{(\pm)}(x, x') &= -i \langle [C_1(x), C_2(x')]_{\pm} \rangle \theta(-t) \equiv \\ &\equiv \langle \langle C_1(x) | C_2(x') \rangle \rangle_a^{(\pm)}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Здесь $\theta(t)$ — известная ступенчатая функция

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } t < 0, \\ 1 & \text{при } t > 0. \end{cases}$$

Таким образом, функции (3.1) — (3.4) при $t = x_0 - x'_0 = 0$ имеют особенности.

Выражения (3.1), (3.2) и (3.3), (3.4) называются соответственно запаздывающей и опережающей функциями Грина (что и обозначается индексами r и a). Основания для этого выяснятся в § 7, где мы получим уравнения для некоторых наиболее часто встречающихся функций типа (3.1) — (3.4).

Допустим, что спектральная функция $J(\lambda, \lambda'; E)$, соответствующая $\langle C_1(x) C_2(x') \rangle$, достаточно быстро убывает при $E \rightarrow \infty$. Все дальнейшие выкладки (§§ 3—5) будут проведены в этом предположении. Заметим, что обобщение на случай не убывающих на бесконечности спектральных функций можно провести точно так же, как это делается в теории поля [10].

В состоянии равновесия функции (3.1) — (3.4) зависят только от разности временных аргументов $x_0 - x'_0 = t$.

¹⁾ См. [4—8].

Введем для компактности индекс j , принимающий значения r и a , и положим

$$K_j(\lambda, \lambda'; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE K_j(\lambda, \lambda'; E) e^{-iEt}, \quad (3.5)$$

$$K_j(\lambda, \lambda'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt K_j(\lambda, \lambda'; t) e^{iEt}. \quad (3.6)$$

На основании (3.1), (3.3) и (3.6) видим, что функция $K_r(\lambda, \lambda'; E)$ аналитична в верхней полуплоскости комплексной переменной E . Действительно, при $t < 0$ функция $K_r(\lambda, \lambda'; t) = 0$, а при $t > 0$ экспонента e^{iEt} содержит множитель $e^{-t \operatorname{Im} E}$, экспоненциально убывающий при $\operatorname{Im} E > 0$ и обеспечивающий сходимость как интеграла в (3.6), так и всех его производных по E . Равным образом, функция $K_a(\lambda, \lambda'; E)$ оказывается аналитической в нижней E -полуплоскости.

Фурье-образы функции Грина (3.5), (3.6) легко связать с введенной в предыдущем параграфе спектральной функцией $J(\lambda, \lambda'; E)$. Действительно, на основании (2.1) — (2.5) мы получаем

$$K_r(\lambda, \lambda'; t) = i\theta(t) \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} J(\lambda, \lambda'; E);$$

сопоставляя это с (3.5), получаем (при вещественных E)

$$K_r(\lambda, \lambda'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{J(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E - i\varepsilon}, \quad (3.7)$$

где ε — положительное число. Здесь и в дальнейшем в аналогичных выражениях всегда имеется в виду предельный переход при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Аналогично

$$K_a(\lambda, \lambda'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{J(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E + i\varepsilon}. \quad (3.8)$$

Таким образом, в комплексной E -плоскости мы имеем

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{iJ(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E} = \begin{cases} K_r(\lambda, \lambda'; E), & \operatorname{Im} E > 0, \\ K_a(\lambda, \lambda'; E), & \operatorname{Im} E < 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

Левая часть (3.9) представляет собой интеграл типа Коши. Следовательно, совокупность K_r и K_a можно рассматривать как единую аналитическую функцию $K(\lambda, \lambda'; E)$, определенную во всей плоскости комплексной переменной E с разрезом, вообще говоря, вдоль вещественной оси. Видно также, что спектральная функция $J(\lambda, \lambda'; E)$ непосредственно выражается через предельные значения $K(\lambda, \lambda'; E)$ на верхнем и нижнем краях разреза. Действительно, при приближении к вещественной оси сверху и снизу (см., например, [11]) соответствующие предельные значения (3.9) имеют вид¹⁾

$$\frac{1}{i} K(\lambda, \lambda'; E + i\varepsilon) = \frac{1}{2} J(\lambda, \lambda'; E) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \mathcal{P} \frac{J(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E}, \quad (3.10)$$

$$\frac{1}{i} K(\lambda, \lambda'; E - i\varepsilon) = -\frac{1}{2} J(\lambda, \lambda'; E) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \mathcal{P} \frac{J(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E},$$

откуда (при вещественных E)

$$\begin{aligned} J(\lambda, \lambda'; E) &= \frac{1}{i} \{K(\lambda, \lambda'; E + i\varepsilon) - K(\lambda, \lambda'; E - i\varepsilon)\} \equiv \\ &\equiv \frac{1}{i} \{K_r(\lambda, \lambda'; E) - K_a(\lambda, \lambda'; E)\}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Заметим, что вещественность спектральной функции J при этом отнюдь не предполагается.

Аналогичные спектральные представления имеют место и для функций $K_f^{(\pm)}$. Так, например, пользуясь (2.2) — (2.4), мы получаем

$$\begin{aligned} K_r^{(\pm)}(x, x') &= i\theta(t) \sum_{n, n'} p_n \{(\Phi_n, C_1(\lambda, x_0=0) \Phi_{n'}) \times \\ &\times (\Phi_{n'}, C_2(\lambda', x'_0=0) \Phi_n) e^{-i(E_{n'} - E_n)t} \pm \\ &\pm (\Phi_n, C_2(\lambda', x'_0=0) \Phi_{n'}) \times \\ &\times (\Phi_{n'}, C_1(\lambda, x_0=0) \Phi_n) e^{-i(E_n - E_{n'})t}\}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

¹⁾ Можно воспользоваться также равенствами (3.7) и (3.8) и тождеством $\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp \pi i \delta(x)$, $x \in \text{Re}$ ($\mathcal{P}$ — символ главного значения).

Производя во втором слагаемом в фигурных скобках замену индексов суммирования $n' \rightleftharpoons n$ и пользуясь (2.1) и (2.5), находим окончательно

$$K_f^{(\pm)}(\lambda, \lambda'; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE K_f^{(\pm)}(\lambda, \lambda'; E) e^{-iEt}, \quad (3.13)$$

где

$$K_r^{(\pm)}(\lambda, \lambda'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{J(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E - i\varepsilon} (1 \pm e^{-\beta E'}), \quad (3.14)$$

$$K_a^{(\pm)}(\lambda, \lambda'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{J(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E + i\varepsilon} (1 \pm e^{-\beta E'}). \quad (3.15)$$

Опять видим, что совокупность $K_a^{(+)}(\lambda, \lambda'; E)$, $K_r^{(+)}(\lambda, \lambda'; E)$ (или $K_a^{(-)}$, $K_r^{(-)}$) можно рассматривать как единую аналитическую функцию $K^{(+)}$ комплексной переменной E (с разрезом вдоль вещественной оси). Для спектральной функции легко получается формула типа (3.11)

$$\begin{aligned} J(\lambda, \lambda'; E) = \\ = \frac{(1 \pm e^{-\beta E})^{-1}}{i} \{K^{(\pm)}(\lambda, \lambda'; E + i\varepsilon) - K^{(\pm)}(\lambda, \lambda'; E - i\varepsilon)\}; \end{aligned} \quad (3.16)$$

здесь E вещественно.

В § 2 мы видели, что как обычные средние по ансамблю, так и временные корреляционные функции для двух произвольных динамических переменных непосредственно выражаются через соответствующую спектральную функцию J [см. (2.6) — (2.9)]. Таким образом, задача о вычислении названных величин сводится к нахождению фурье-образов соответствующих функций Грина. В ряде случаев этот путь оказывается более удобным, чем непосредственное решение цепочки уравнений для последовательности операторов $\rho_1, \rho_2, \dots$

Введем, наконец, функцию Грина еще одного типа, так называемую «причинную»

$$K_c(x, x') = i \langle T \{ C_1(x) C_2(x') \} \rangle. \quad (3.17)$$

Здесь символ T означает упорядоченное во времени произведение операторов¹⁾

$$T\{C_1(x)C_2(x')\} = \begin{cases} C_1(x)C_2(x'), & x_0 > x'_0, \\ \eta C_2(x')C_1(x), & x_0 < x'_0. \end{cases} \quad (3.18)$$

Величина η равна $+1$ или -1 в зависимости от четности перестановки фермиевских операторов порождения и уничтожения при переходе от C_1C_2 к C_2C_1 . Если C_1 и C_2 составлены только из бозе-операторов, то $\eta = 1$. Из определения видно, в частности, что под знаком T -произведения все бозевские операторы можно считать коммутирующими друг с другом, а все фермиевские — антикоммутирующими. Очевидно, функция $K_c(x, x')$ представляет собой линейную комбинацию K_r и K_a (с разным порядком следования операторов). Подобно тому, как мы получали (3.12) — (3.15), легко находим

$$K_c(\lambda, \lambda'; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE K_c(\lambda, \lambda'; E) e^{-iEt}, \quad (3.19)$$

$$K_c(\lambda, \lambda'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \left\{ \frac{J(\lambda, \lambda'; E')}{E' - E - i\epsilon} - \eta \frac{J(\lambda, \lambda'; E') e^{-\beta E'}}{E' - E + i\epsilon} \right\}. \quad (3.20)$$

Из (2.11) можно видеть, что причинная функция Грина обладает свойством

$$K_c(t)|_{t>0} = \eta K_c(t + i\beta)|_{t<0}. \quad (3.21)$$

Из формулы (3.20) следует, что, в отличие от K_j и $K_j^{(\pm)}$, функция $K_c(\lambda, \lambda'; E)$, вообще говоря, не является аналитической и не допускает расширения в комплексную плоскость. Существенно, однако, что в формулах для всех функций Грина K_j , $K_j^{(\pm)}$ и K_c при заданных операторах C_1 и C_2 фигурирует одна и та же спектральная функция $J(\lambda, \lambda'; E)$. Поэтому с точки зрения исследования энергетического спектра и матричных элементов операторов ρ_s безразлично, какой именно функцией Грина мы будем пользоваться.

¹⁾ По поводу смысла названия «причинная» функция Грина и ее роли в квантовой теории поля см. приложение I.

В заключение следует сделать еще два замечания. Во-первых, как видно из (3.1) — (3.4) и (3.17), все рассматриваемые нами функции Грина однозначно определены лишь при $x'_0 \neq x_0$. При совпадении временных аргументов они имеют особенности, которые, в конечном счете, и обуславливают появление знаменателей $E - E' \pm i\varepsilon$. Именно это обстоятельство приводит к представлению K_r , K_a и т. д. в виде интегралов типа Коши, т. е. позволяет рассматривать функции Грина во всей комплексной плоскости, но оно же и приводит к необходимости особо оговаривать, какие именно предельные значения их при $x'_0 \rightarrow x_0$ мы имеем в виду (ср. ниже, § 5). Во-вторых, в этом параграфе мы ограничились только двухвременными величинами, поскольку они достаточны для решения конкретных задач, рассмотренных в этой книге. Можно, однако, получить спектральные представления и для многовременных функций Грина (см. приложение IV).

§ 4. Диагональные элементы функций Грина. Дисперсионные соотношения ¹⁾

В настоящем параграфе мы рассмотрим важный случай, когда $C_2 = \bar{C}_1$ и $\lambda' = \lambda$. Таким образом, мы будем иметь дело с величинами типа

$$K_r(\lambda, t) = i\theta(t) \langle C_1(\lambda, x_0) \bar{C}_1(\lambda, x'_0) \rangle. \quad (4.1)$$

Аналогично определяются функции K_a , $K_a^{(\pm)}$, $K_r^{(\pm)}$, K_c . Именно они (см. § 1) определяют диагональные матричные элементы операторов $\rho_1, \rho_2, \dots$; с ними же приходится иметь дело и при исследовании энергетического спектра системы (§ 2). В непрерывном спектре возможен случай, когда, например, $K_r(\lambda, \lambda'; E) \sim \delta(\lambda - \lambda')$. (Так, в частности, обстоит дело в пространственно однородной системе, когда роль λ играют три компоненты импульса.) В таких случаях под диагональными элементами, фигурирующими в дальнейших соотношениях, следует понимать коэффициенты при δ -функции.

¹⁾ См. [4] — [8].

В силу (2.5) мы имеем теперь

$$\begin{aligned} J(\lambda, \lambda; E) &\equiv J(\lambda, E) = \\ &= \sum_{n, n'} p_n (\Phi_n, C_1(\lambda, x_0=0) \Phi_{n'}) \times \\ &\times (\Phi_{n'}, \bar{C}_1(\lambda, x'_0=0) \Phi_n) \delta(E - E_{n'} + E_n) = \\ &= \sum_{n, n'} p_n \delta(E - E_{n'} + E_n) |(\Phi_n, C_1 \Phi_{n'})|^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Итак, спектральная функция оказывается вещественной положительной величиной. Равенство (3.11) для вещественных E дает при этом

$$J(\lambda, E) = \operatorname{Im} K_r(\lambda, E) - \operatorname{Im} K_a(\lambda, E). \quad (4.3)$$

Таким образом, исследование энергетического спектра системы сводится к исследованию особенностей мнимой части аналитической функции $K(\lambda, E)$ комплексной переменной E . Далее, отделяя в формулах (3.7) и (3.8) вещественную часть от мнимой, получаем в силу (3.11)

$$J(\lambda, E) = 2 \operatorname{Im} K_r(\lambda, E) = -2 \operatorname{Im} K_a(\lambda, E), \quad (4.4)$$

$$\operatorname{Re} K_j(\lambda, E) = \pm \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} K_j(\lambda, E')}{E' - E}. \quad (4.5)$$

Здесь плюс берется для $j=r$, минус — для $j=a$. Аналогичные соотношения получаются и для других функций Грина. Именно:

$$J(\lambda, E) = \frac{2 \operatorname{Im} K_r^{(\pm)}(\lambda, E)}{1 \pm e^{-\beta E}} = - \frac{2 \operatorname{Im} K_a^{(\pm)}(\lambda, E)}{1 \pm e^{-\beta E}}, \quad (4.6)$$

$$\operatorname{Re} K_r^{(\pm)}(\lambda, E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} K_r^{(\pm)}(\lambda, E')}{E' - E}, \quad (4.7)$$

$$\operatorname{Re} K_a^{(\pm)}(\lambda, E) = - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} K_a^{(\pm)}(\lambda, E')}{E' - E}, \quad (4.8)$$

$$J(\lambda, E) = \frac{2 \operatorname{Im} K_c(\lambda, E)}{1 + \eta e^{-\beta E}}, \quad (4.9)$$

$$\operatorname{Re} K_c(\lambda, E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{1 - \eta e^{-\beta E'}}{1 + \eta e^{-\beta E'}} \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} K_c(\lambda, E')}{E' - E}. \quad (4.10)$$

Во всех формулах (4.4)—(4.10) E — вещественная величина. Из формул (4.4) и (4.6) особенно ясно виден характер особенностей функций Грина на вещественной оси: вообще говоря, мнимая часть $K(\lambda, E)$ испытывает там конечный скачок. Исключение составляет случай дельтаобразной сингулярности $J(\lambda, E)$, когда $\text{Im } K(\lambda, E)$ отлична от нуля лишь в отдельных точках E_i . (Как мы видели в § 2, эти точки при $T=0$ суть точные собственные значения энергии системы.) Поскольку согласно (4.2) спектральная функция $J(\lambda, E) \geq 0$, формулы (4.4), (4.6) и (4.9) определяют также знаки мнимых частей соответствующих функций Грина. Обратим внимание на существенную разницу в поведении $\text{Im } K_{r,a}^{(\pm)}$ и $\text{Im } K_c$ в зависимости от того, какие знаки стоят в знаменателях (4.6) и (4.9). При знаке плюс названные функции знакопостоянны ($\text{Im } K_r^{(+)} > 0$, $\text{Im } K_a^{(+)} < 0$, $\text{Im } K_c > 0$), а при знаке минус они меняют знак в точке $E=0$. Последнее обстоятельство мы используем в дальнейшем для определения химического потенциала системы (см. § 5). Заметим также, что при знаке минус в знаменателях (4.6) и (4.7) в правых частях этих равенств может появиться слагаемое $C\delta(E)$. Величина C определяется из дополнительных соображений типа условия сохранения числа частиц.

Соотношения типа (4.5), (4.7), (4.8) и (4.10) называются дисперсионными. Они широко используются в современной квантовой теории поля [10]. Для нас будет существенно, что, как видно из этих соотношений, все функции $K_r(\lambda, E)$, $K_a(\lambda, E)$ и т. д. полностью определяются заданием только мнимой части какой-либо одной из них. Это же относится и к введенной в § 2 и представляющей уже непосредственный физический интерес функции $K(x, x')$ (при $\lambda' = \lambda$, $C_2 = \bar{C}_1$). Так, например, на основании (2.7), (4.4), (4.6) и (4.9) мы имеем

$$\begin{aligned} \langle \bar{C}_1(\lambda, x_0) C_1(\lambda, x'_0) \rangle &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\text{Im } K_c(\lambda, E)}{e^{\beta E} + \eta} e^{-iE(x_0 - x'_0)} = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\text{Im } K_r^{(\pm)}(\lambda, E)}{e^{\beta E} \pm 1} e^{-iE(x_0 - x'_0)}. \quad (4.11) \end{aligned}$$

При $x'_0 = x_0$ эти формулы выражают диагональные матричные элементы операторов $\rho_1, \rho_2, \dots$ через мнимые части соответствующих функций Грина; при $x'_0 \neq x_0$ они дают временные корреляционные функции.

Диагональные элементы запаздывающей и опережающей функций Грина удовлетворяют одному важному неравенству. Именно, на основании (3.5), (3.6) и (2.5) мы имеем для фурье-образов по времени

$$\langle\langle C_1(\lambda_1) | C_1(\lambda_1) \rangle\rangle^j|_{E=0} = \frac{1}{2\pi} \sum_{n, n'} p_n \frac{|\langle \Phi_n, C_1(\lambda_1, x_0=0) \Phi_{n'} \rangle|^2}{E_{n'} - E_n \pm i\varepsilon}, \quad (4.12)$$

$$\langle\langle C_2(\lambda_2) | C_2(\lambda_2) \rangle\rangle^j|_{E=0} = \frac{1}{2\pi} \sum_{n, n'} p_n \frac{|\langle \Phi_n, C_2(\lambda_2, x'_0=0) \Phi_{n'} \rangle|^2}{E_{n'} - E_n \pm i\varepsilon}, \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle C_1(\lambda_1) | C_2(\lambda_2) \rangle\rangle^j|_{E=0} &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n, n'} p_n \langle \Phi_n, C_1(\lambda_1, x_0=0) \Phi_{n'} \rangle \times \\ &\times \langle \Phi_{n'}, C_2(\lambda_2, x'_0=0) \Phi_n \rangle \frac{1}{E_{n'} - E_n \pm i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Здесь, как и выше, знак плюс берется для $j=a$, минус — для $j=r$.

Составляя произведение абсолютных величин (4.12) и (4.13), сравнивая результат с (4.14) и пользуясь неравенством Шварца, видим, что

$$\begin{aligned} |\langle\langle C_1(\lambda_1) | C_1(\lambda_1) \rangle\rangle|_{E=0} |\langle\langle C_2(\lambda_2) | C_2(\lambda_2) \rangle\rangle|_{E=0} &\geq \\ &\geq |\langle\langle C_1(\lambda_1) | C_2(\lambda_2) \rangle\rangle|_{E=0}^2. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Это и есть искомое неравенство¹⁾.

§ 5. Простейшие функции Грина

До сих пор природа операторов C_1 и C_2 никак не специализировалась. Рассмотрим теперь частные случаи, которые представят в дальнейшем наибольший интерес.

¹⁾ Авторы выражают признательность Н. Н. Боголюбову, указавшему им на это неравенство и способ его доказательства.

а) **Однофермионная функция Грина.** Положим $C_1 = a$, $C_2 = \bar{a}$, где $\bar{a}$, a — фермиевские операторы порождения и уничтожения частиц.

В этом случае матричные элементы, фигурирующие в (5.2), суть

$$(\Phi_n, a(\lambda) \Phi_{n'}), \quad (\Phi_n, \bar{a}(\lambda) \Phi_{n'}). \quad (5.1)$$

Как известно, они отличны от нуля, если числа частиц в состояниях n и n' отличаются друг от друга на единицу. Отсюда следует, что дельтаобразные особенности спектральной функции в данном случае определяют изменение энергии ферми-системы при изменении числа частиц в ней на единицу. При этом предполагается, что частица добавляется в состояние λ (или изымается из него). Подчеркнем, что состояния λ были введены нами в § 1 просто как некая базисная система, с помощью которой был произведен переход к представлению вторичного квантования. Они, вообще говоря, отнюдь не обязаны быть стационарными; соответственно, спектральная функция может и не иметь особенностей указанного вида. В отсутствие взаимодействия между частицами, однако, всегда можно выбрать в качестве базисной системы собственные функции гамильтониана; при этом $J(\lambda, E)$ имеет только дельтаобразные особенности в точках E , представляющих собой просто значения энергии отдельных частиц. При наличии взаимодействия состояния $\bar{a}(\lambda) \Phi_n$, строго говоря, всегда не стационарны. Соответственно особенности спектральной функции $J(\lambda, E)$ не имеют чисто дельтаобразного характера, и состояние с $\bar{a}(\lambda) \Phi_n$ затухает при $t \rightarrow \infty$ (ср. § 2). При достаточно малом затухании, однако, можно в соответствии с § 2 ввести представление о квазистационарных «одночастичных» состояниях, характеризующихся некоторой энергией и затуханием. Действительно, вычисляя вероятности переходов в системе под влиянием гармонической внешней силы, легко убедиться, что именно частота, определяющая осцилляции амплитуды состояния при $t \rightarrow \infty$, входит в закон сохранения энергии (см. пример в гл. VI). При этом, как всегда в таких случаях, энергия «одночастичного» состояния сохраняется лишь с точностью до неопределенности, связанной с затуханием. Подчеркнем, что фактически энергии «одночастичных» состояний следует относить уже не к отдельным частицам, а ко всей системе в целом. На языке квантовой теории поля

это обстоятельство принято выражать термином «одетые» частицы (фермионы). С помощью формулы (1.15) при $C_1 = a$, $C_2 = \bar{a}$ легко убедиться, что затухание фермионных состояний определяется полюсами аналитического продолжения спектральной функции в нижнюю E -полуплоскость (при $\text{Re } E > 0$). Полюсы же в верхней полуплоскости (при $\text{Re } E < 0$) описывают затухание соответствующих «дырочных» состояний.

Соответствующие функции Грина называются однофермионными; мы будем обозначать их символом G :

$$\begin{aligned} G_c(x, x') &= i \langle T \{ a(x) \bar{a}(x') \} \rangle, \\ G_j^{(\pm)}(x, x') &= \langle \langle a(x) | \bar{a}(x') \rangle \rangle_j^{(\pm)}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Очевидно, формулы (4.11) при $C_1 = a$ и $x_0 = x'_0$ дают функцию распределения $f(\lambda)$ (напомним, что в данном случае $\eta = -1$).

Отметим, в частности, два случая:

1) $\lambda = \{x, s\}$ — совокупности трех пространственных координат x и спиновой переменной s . Тогда левая часть (4.11) при $x'_0 = x_0$ есть средняя концентрация электронов с проекцией спина s в точке x , а полная концентрация электронов $n(x)$ дается формулами

$$\begin{aligned} n(x) &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\sum_s \text{Im } G_c(x, s; E)}{e^{\beta E} - 1} = \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\sum_s \text{Im } G_r^{(\pm)}(x, s; E)}{e^{\beta E} \pm 1}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Подчеркнем здесь, что в знаменателе первой из формул (5.3) должен стоять именно знак минус (а не плюс, как могло бы показаться). Следует обратить внимание на то, что $n(x)$ согласно (5.2) можно также представить в виде

$$n(x) = i \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x'_0 > x_0}} \sum_s G_c(x, s; x', s) \equiv i \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x'_0 > x_0}} \text{Sp } G_c(x, x'). \quad (5.4)$$

Это соотношение определяет, как следует выполнять предельный переход $x'_0 \rightarrow x_0$ в функции $G_c(x, x')$ (ср. замечание

в конце § 2); именно:

$$G_c(\lambda, x_0; \lambda', x_0) = \lim_{\substack{x'_0 \rightarrow x_0 \\ x'_0 > x_0}} G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0). \quad (5.5)$$

2) $\lambda = \{p, s\}$ — совокупности трех компонент импульса p и спиновой переменной s . Будем рассматривать при этом пространственно однородную систему, когда функция $G_c(\lambda, \lambda'; t)$ диагональна по импульсам; пусть, кроме того, она диагональна также и по спинам. Условимся переходить к импульсному представлению по формуле

$$G_c(x, x_0; x', x'_0) = \int dp G_c(p, p_0) e^{-i(p, x - x')}, \quad (5.6)$$

где $px = p_0x_0 - px$, $dp = d\mathbf{p} dp_0$; переменная p_0 употребляется здесь вместо E для симметрии записи. Тогда формулы (4.11) (при $x'_0 = x_0$) превращаются в общие выражения для функции распределения электронов по импульсам $f(p)$; с учетом нормировки (5.6) мы получаем

$$\begin{aligned} f(p) &= 2(2\pi)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 \frac{\text{Im } G_c(p, p_0)}{e^{\beta p_0} - 1} = \\ &= 2(2\pi)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 \frac{\text{Im } G_r^{(\pm)}(p, p_0)}{e^{\beta p_0} \pm 1}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Функция (5.7) нормирована на числа заполнения.

Заметим, что из определения (5.2) вытекают следующие свойства функции $G_j^{(+)}(p, E)$ в комплексной плоскости E ¹⁾:

$$\begin{aligned} \langle \langle \bar{a}(p) | a(p) \rangle \rangle_E &= -\langle \langle a(p) | \bar{a}(p) \rangle \rangle_{-E}, \\ \langle \langle a(-p) | a(p) \rangle \rangle_E &= -\langle \langle a(p) | a(-p) \rangle \rangle_{-E}, \\ \langle \langle \bar{a}(-p) | \bar{a}(p) \rangle \rangle_E &= -\langle \langle \bar{a}(p) | \bar{a}(-p) \rangle \rangle_{-E}. \end{aligned} \quad (5.8a)$$

Далее, из инвариантности уравнений движения (2.3) по

¹⁾ Авторы признательны Н. Н. Боголюбову, обратившему их внимание на важность этих соотношений.

отношению к замене знака времени (с одновременной заменой $i \rightarrow -i$) следует

$$\langle \langle \bar{a}(-p) | \bar{a}(p) \rangle \rangle_E = \langle \langle a(p) | a(-p) \rangle \rangle_E. \quad (5.86)$$

Наконец, свойство инвариантности по отношению к пространственным отражениям дает

$$\begin{aligned} \langle \langle a(p) | a(-p) \rangle \rangle_E &= \langle \langle a(-p) | a(p) \rangle \rangle_E, \\ \langle \langle \bar{a}(p) | \bar{a}(-p) \rangle \rangle_E &= \langle \langle \bar{a}(-p) | \bar{a}(p) \rangle \rangle_E, \\ \langle \langle a(p) | \bar{a}(p) \rangle \rangle_E &= \langle \langle a(-p) | \bar{a}(-p) \rangle \rangle_E. \end{aligned} \quad (5.8в)$$

Вспомним теперь, что величины $E_n, E_{n'}$ в (2.5) суть по определению собственные значения обобщенного гамильтониана (1.7) $H' = H - \mu N$ (см. § 1). Принимая во внимание отмеченные выше свойства матричных элементов (5.1), видим, что в данном случае

$$E = W - \mu,$$

где W — разность собственных значений H , принадлежащих состояниям, в которых числа частиц отличаются на единицу. (Приведенное равенство имеет место, поскольку в рассматриваемом случае операторы H и N коммутируют.) Из формулы (4.9), с другой стороны, вытекает, что в данном случае (знак минус в знаменателе) функция $\text{Im } G_c(\lambda, E)$ меняет знак вместе с E (причем $\text{sign } \text{Im } G_c(\lambda, E) = \text{sign } E$, так что других точек изменения знака мнимой части $G_c(\lambda, E)$ не существует). Таким образом, можно сформулировать правило для определения химического потенциала системы взаимодействующих ферми-частиц: химический потенциал μ равен энергии W , при которой мнимая часть однофермионной функции Грина $\text{Im } G_c(\lambda, W - \mu)$ меняет знак. (Вместо $\text{Im } G_c$ можно взять также $\text{Im } G_r^{(-)}(\lambda, E)$ или $\text{Im } G_a^{(-)}(\lambda, E)$.)

Рассмотрим специально случай идеального газа — систему ферми-частиц, движущихся в некотором заданном и постоянном во времени внешнем поле, но не взаимодействующих друг с другом (разбор этого случая не только представляет методический интерес, но и окажется полезным при приближенном решении уравнений для полных функций Грина — м. § 11). В качестве параметров λ здесь удобно выбрать

квантовые числа, характеризующие стационарные состояния отдельных частиц в данном поле. Соответствующие собственные значения энергии и собственные функции (в координатном представлении) обозначим через $E(\lambda) = W(\lambda) - \mu$ и $\varphi_\lambda(x)$. Индексы n, n' , характеризующие состояния всей системы, в данном случае указывают, какие именно из одночастичных состояний φ_λ являются занятыми; полная энергия E_n представляет собой сумму энергий отдельных частиц по всем занятым состояниям.

Все функции Грина (которые мы снабдим в этом случае индексом 0) здесь легко вычисляются. Возьмем, например, причинную функцию $G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0)$. На основании (3.17) и (3.18) мы имеем

$$G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) = i \langle T \{ a(\lambda, x_0) \bar{a}(\lambda', x'_0) \} \rangle = \\ = \begin{cases} i \langle a(\lambda, x_0) \bar{a}(\lambda', x'_0) \rangle, & x_0 > x'_0, \\ -i \langle \bar{a}(\lambda', x'_0) a(\lambda, x_0) \rangle, & x_0 < x'_0. \end{cases}$$

Зависимость оператора $a(\lambda, x_0)$ от времени в данном случае описывается просто множителем $\exp \{-iE(\lambda)x_0\}$; соответственно

$$\langle \bar{a}(\lambda', x'_0) a(\lambda, x_0) \rangle = \langle \bar{a}(\lambda', 0) a(\lambda, 0) \rangle e^{-iE(\lambda)x_0 + iE(\lambda')x'_0}.$$

В рассматриваемом случае различным значениям λ отвечают и различные собственные функции системы; поэтому

$$\langle \bar{a}(\lambda', 0) a(\lambda, 0) \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \langle \bar{a}(\lambda, 0) a(\lambda, 0) \rangle = \delta(\lambda - \lambda') n_F(\lambda), \quad (5.9)$$

где $n_F(\lambda)$ есть среднее значение числа заполнения состояния λ . Оно, очевидно, дается обычной функцией Ферми (напомним, что последняя как раз и получается в результате вычисления шпура, фигурирующего в (5.9))¹⁾. Аналогично

$$\langle a(\lambda, x_0) \bar{a}(\lambda', x'_0) \rangle = \\ = e^{-iE(\lambda)x_0 + iE(\lambda')x'_0} \delta(\lambda - \lambda') [1 - n_F(\lambda)]. \quad (5.10)$$

¹⁾ См., например, [2].

Таким образом,

$$G_c^{(0)}(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) = \\ = i\delta(\lambda - \lambda') e^{-iE(\lambda)(x_0 - x'_0)} \{ \theta(x_0 - x'_0) [1 - n_F(\lambda)] - \\ - \theta(x'_0 - x_0) n_F(\lambda) \}, \quad (5.11)$$

где

$$n_F(\lambda) = \frac{1}{e^{\beta W(\lambda) - \beta\mu} + 1}. \quad (5.12)$$

Для фурье-образа мы получим

$$G_c^{(0)}(\lambda, \lambda'; E) = -\frac{1}{2\pi} \delta(\lambda - \lambda') \left\{ \frac{n_F(\lambda)}{E - E(\lambda) - i\varepsilon} + \right. \\ \left. + \frac{1 - n_F(\lambda)}{E - E(\lambda) + i\varepsilon} \right\} \equiv \delta(\lambda - \lambda') G_c^{(0)}(\lambda, E). \quad (5.13)$$

Соответственно в координатном представлении мы имеем (s, s' — спинные координаты)

$$G_c^{(0)}(x, s, x_0; x', s', x'_0) = \\ = \sum_{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \varphi_{\lambda}(x, s) \bar{\varphi}_{\lambda}(x', s') e^{-iE(x_0 - x'_0)} G_c^{(0)}(\lambda, E) \quad (5.14)$$

(сумма по λ , как всегда, может обозначать и интеграл). Выражение в фигурных скобках в (5.13) становится разрывным в условиях полного вырождения: при $T \rightarrow 0$ $n(\lambda) = 1$, если $W(\lambda) < \mu$, и $n(\lambda) = 0$, если $W(\lambda) > \mu$. В этом случае может оказаться более удобным эквивалентное (при $T = 0$) выражение

$$G_c^{(0)}(\lambda, E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{E - E(\lambda) + i\varepsilon \operatorname{sign}[W(\lambda) - \mu]}. \quad (5.13a)$$

Аналогично для опережающей и запаздывающей функций Грина мы получаем

$$\left. \begin{aligned} G_r^{(0), (+)}(\lambda, \lambda'; E) &= -\frac{1}{2\pi} \delta(\lambda - \lambda') \frac{1}{E - E(\lambda) + i\varepsilon}, \\ G_a^{(0), (+)}(\lambda, \lambda'; E) &= -\frac{1}{2\pi} \delta(\lambda - \lambda') \frac{1}{E - E(\lambda) - i\varepsilon}, \end{aligned} \right\} \quad (5.15)$$

$$\left. \begin{aligned} G_r^{(0)}(\lambda, \lambda'; E) &= -\frac{1}{2\pi} \delta(\lambda - \lambda') \frac{1 - n_F(\lambda)}{E - E(\lambda) + i\varepsilon}, \\ G_a^{(0)}(\lambda, \lambda'; E) &= -\frac{1}{2\pi} \delta(\lambda - \lambda') \frac{1 - n_F(\lambda)}{E - E(\lambda) - i\varepsilon}. \end{aligned} \right\} \quad (5.16)$$

Любопытно, что «антикоммутирующие» функции Грина $G_j^{(0), (+)}$ для свободного электронного газа вообще не зависят от температуры.

Видно, что полюсы (5.13), (5.15) и (5.16) действительно связаны с энергетическим спектром системы. Пользуясь равенством (4.3) (или (4.9) при знаке минус в знаменателе), можно найти спектральную функцию

$$J^{(0)}(\lambda, E) = [1 - n_F(\lambda)] \delta[E - E(\lambda)]. \quad (5.17)$$

Как и следовало ожидать, она оказывается дельтаобразной. В данном случае этот результат тривиален: взаимодействия между частицами нет, поэтому затухание отсутствует, и собственные значения оператора энергии одной частицы $W(\lambda)$ определяют точные изменения энергии всей системы при изменении числа частиц в последней на единицу (при добавлении частицы в состояние λ к полной энергии добавляется слагаемое $W(\lambda)$).

Мнимая часть $G_c^{(0)}(\lambda, E)$ в силу (5.13) есть

$$\begin{aligned} \text{Im } G_c^{(0)}(\lambda, E) &= \frac{1 - 2n_F(\lambda)}{2} \delta[E - E(\lambda)] = \\ &= \frac{1}{2} \text{th} \left(\frac{\beta}{2} [W(\lambda) - \mu] \right) \delta[E - E(\lambda)]. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Видно, что она в соответствии с общими результатами § 4 меняет знак в точке $W(\lambda) = \mu$.

Пользуясь (5.18), легко проверить и справедливость соотношения (4.11). При $x'_0 = x_0$ оно в данном случае превращается просто в тождество.

Наконец, выпишем явно функции Грина для случая свободных частиц, движущихся (в отсутствие внешнего поля) в кубе объема V . Этот случай представляет особый интерес для дальнейшего, ибо именно к нему, как мы увидим в гл. 4, сводится целый ряд задач электронной теории твердого тела. Роль λ в данном случае играет совокупность вектора импульса $\mathbf{p}$ и спинового квантового числа σ .

В качестве граничных условий на поверхности куба возьмем обычные условия периодичности (такой подход годится всегда, пока мы не интересуемся поверхностными эффектами как таковыми). Таким образом, $\varphi_\lambda(\mathbf{x}) = V^{-1/2} S_\sigma(s) e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}$, где

S — спинная функция, и равенство (5.14) дает

$$G_c^{(0)}(x, s, x_0; x', s', x'_0) = \\ = -\frac{\delta_{ss'}}{V} \cdot \frac{1}{2\pi} \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \int dE e^{-iE(x_0-x'_0)} e^{i(p, x-x')} \left\{ \frac{n_F(p)}{E-E(p)-i\varepsilon} + \right. \\ \left. + \frac{1-n_F(p)}{E-E(p)+i\varepsilon} \right\}.$$

Переходя здесь от суммирования к интегрированию, заменяя E на p_0 и принимая во внимание нормировку (5.6), получаем

$$G_c^{(0)}(x, s, x_0; x', s', x'_0) = \delta_{ss'} \int dp e^{-i(p, x-x')} G_c^{(0)}(p, p_0), \quad (5.19)$$

$$G_c^{(0)}(p, p_0) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \left\{ \frac{n_F(p)}{p_0-E(p)-i\varepsilon} + \frac{1-n_F(p)}{p_0-E(p)+i\varepsilon} \right\} = \\ = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{p_0-E(p)+i\varepsilon [2n_F(p)-1]}{[p_0-E(p)]^2+\varepsilon^2}. \quad (5.20)$$

Аналогично

$$G_r^{(0)}(p, p_0) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{1-n_F(p)}{p_0-E(p)+i\varepsilon}, \quad (5.21)$$

$$G_a^{(0)}(p, p_0) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{1-n_F(p)}{p_0-E(p)-i\varepsilon},$$

$$G_r^{(0), (+)}(p, p_0) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{1}{p_0-E(p)+i\varepsilon}, \quad (5.22)$$

$$G_a^{(0), (+)}(p, p_0) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{1}{p_0-E(p)-i\varepsilon}.$$

При $T \rightarrow 0$ вместо (5.20) более удобной может оказаться эквивалентная в этих условиях (см. замечание после формулы (5.14)) формула

$$G_c(p, p_0) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{1}{p_0-E(p)+i\varepsilon \operatorname{sign}[W(p)-\mu]}. \quad (5.23)$$

Обратим внимание на тесную аналогию между этим выражением и известной из квантовой теории поля [9] причинной однофермионной функцией Фейнмана. Вакууму квантовой теории поля соответствует здесь основное состояние системы

свободных частиц (все уровни с энергией ниже μ заполнены, все уровни с энергией, превышающей μ , свободны). Будем отсчитывать энергию от μ . Тогда функция $G_c^{(0)}(x, x')$, как и функция Фейнмана, содержит только положительные энергии при $x_0 > x'_0$ и только отрицательные — при $x_0 < x'_0$. Это свойство иногда используется как граничное условие, выделяющее именно причинную функцию среди всех прочих (G_r , G_a и т. д.). Обычно его называют граничным условием Фейнмана. Следует заметить, однако, что так просто дело обстоит лишь в случае свободных частиц; при наличии же взаимодействия между ними функция распределения по импульсам, вообще говоря, отличается от фермиевской.

б) Однобозонная функция Грина. Пусть теперь, как и в п. а), $C_1 = a$, $C_2 = \bar{a}$, но $\bar{a}$, a — бозевские операторы порождения и уничтожения частиц. Соответствующие функции Грина называются однобозонными. Мы будем обозначать их, как и однофермионные, символом G . (Поскольку однофермионная и однобозонная функции Грина никогда не будут употребляться одновременно, недоразумения возникнуть не может.) Матричные элементы, фигурирующие в разложении (4.2), в этом случае по-прежнему даются формулой (5.1). Это позволяет немедленно интерпретировать полюсы спектральной функции как спектр «одетых» бозонов. Формулы (4.11), как и в п. а), дают функцию распределения частиц по параметрам λ ; следует, однако, помнить, что в данном случае $\eta = +1$. Таким образом, формулы (5.3) и (5.7) остаются в силе; следует лишь изменить знаки в знаменателях подынтегральных выражений, содержащих $\text{Im } G_c$: вместо $e^{\beta E} - 1$ теперь надо писать $e^{\beta E} + 1$. Надо также изменить знак в формуле (5.4): плотность числа частиц теперь дается равенством

$$n(x) = -i \lim_{\substack{x'_0 \rightarrow x_0 \\ x'_0 > x_0}} \text{Sp } G_c(x, x'). \quad (5.4a)$$

Подобно однофермионной функции Грина, однобозонная функция $G_j^{(-)}(p, E)$, рассматриваемая в комплексной плоскости E , удовлетворяет важным соотношениям типа (5.8a) — (5.8в), вытекающим из определения $G_j^{(-)}$, а также из свойств инвариантности уравнений движения относительно временных

и пространственных отражений. Единственное отличие связано с разными правилами коммутации бозевских и фермиевских операторов, что приводит к изменению знаков правых частей равенств (5.8а).

в) Двухчастичная функция Грина при попарно совпадающих аргументах. Положим в формулах (3.1)—(3.4) и (3.17): $C_1 = \bar{a}(x_1, x_0) a(x_2, x_0)$, $C_2 = \bar{a}(x'_1, x'_0) a(x'_2, x'_0)$, где $\bar{a}$, a — либо фермиевские, либо бозевские операторы. Иначе говоря, будем рассматривать функции вида

$$G_{2,c} = i \langle T \{ \bar{a}(x_1, x_0) a(x_2, x_0) \bar{a}(x'_1, x'_0) a(x'_2, x'_0) \} \rangle. \quad (5.24)$$

Очевидно, функция (5.24) есть частный случай более общего выражения вида

$$G_{2,c}(x_1, x_2, x_3, x_4) = i \langle T \{ \bar{a}(x_1) a(x_2) \bar{a}(x_3) a(x_4) \} \rangle, \quad (5.25)$$

получающийся в пределе при попарно совпадающих временных аргументах. Величина (5.25) называется двухчастичной функцией Грина (название связано с тем, что оператор, фигурирующий в (5.25) под знаком усреднения, может изменить состояние сразу двух частиц).

Матричные элементы, фигурирующие в спектральной функции (4.2), соответствующей (5.24), суть $(\Phi_n, \bar{a}(x, 0) a(x', 0) \Phi_{n'})$. Они отличны от нуля, лишь если числа частиц в состояниях n и n' одинаковы. Таким образом, полюсы спектральной функции в данном случае определяют спектр возбуждений в системе с заданным числом частиц. Для идеального газа функции типа (5.24) нетрудно вычислить. Рассмотрим, например, запаздывающую функцию Грина для полностью вырожденного ферми-газа ($T=0$) в отсутствие внешнего поля. Принимая во внимание (5.5), получаем (при $x_0 \neq x'_0$)

$$\begin{aligned} G_{2,r}(x, x') &= in^2 + iG_r(x, x') G_r(x', x) = \\ &= in^2 + \frac{i}{(2\pi)^6} \int dp dp' \theta [W(p) - \mu] \times \\ &\times \theta [\mu - W(p')] e^{i(p-p', x-x') - i[W(p) - W(p')](x_0 - x'_0)} \end{aligned} \quad (5.26)$$

(n — постоянная концентрация частиц).

Вводя фурье-образ $G_{2,r}(p, p_0)$ по формуле типа (5.6), видим, что полюсы $\text{Im } G_{2,r}(p, p_0)$ (они же — полюсы спектральной функции) суть

$$p_0 = W(p) - W(p'), \quad W(p) \geq \mu, \quad W(p') \leq \mu. \quad (5.27)$$

Это — очевидное выражение для спектра возбужденных состояний, возникающих при «перебросе» электронов из сферы Ферми «наружу».

г) **Однофотонная функция Грина.** Положим в формуле (3.1) (и следующих за ней) $C_1 = A_\alpha(x)$, $C_2 = A_\beta(x')$, где A_α , A_β — операторы 4-потенциала электромагнитного поля, $\alpha = 0, 1, 2, 3$. Нам удобно будет так же, как и в [9], принять следующую связь между четырехмерными и трехмерными компонентами потенциала: $\{A_1, A_2, A_3\} = \mathbf{A}$ — вектор-потенциал; $-A_0 = \varphi$ — скалярный потенциал. Таким образом, напряженности электрического и магнитного полей даются равенствами

$$E_i = \frac{\partial A_0}{\partial x_i} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial A_i}{\partial x_0} \quad (i = 1, 2, 3); \quad \mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = \mu \mathbf{H}.$$

Здесь c_0 есть скорость света в пустоте. Оптические свойства среды (в отсутствие свободных зарядов) мы будем характеризовать скалярными вещественными диэлектрической и магнитной проницаемостями ϵ и μ , не зависящими от пространственных координат (тем самым мы ограничиваемся рассмотрением оптически однородных и изотропных сред вдали от области поглощения). Скорость света в среде обозначим через $c = \frac{c_0}{\sqrt{\epsilon\mu}}$.

Как показано в приложении I, в указанных условиях можно полностью исключить величины ϵ и μ из уравнений электродинамики, если писать последние для «перенормированных» величин

$$A_i^{(r)} = A_i, \quad A_0^{(r)} = \sqrt{\epsilon\mu} A_0, \quad e^{(r)} = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} e, \quad W^{(r)} = \mu W$$

(e — заряд, W — любая энергетическая величина, связанная с электромагнитным полем, например плотность энергии свободного поля или энергия заряда в поле и т. д.). При этом скорость света c_0 всюду заменяется на c . В дальнейшем (исключая гл. VII) мы будем пользоваться только перенор-

мированными величинами, опуская индекс r . Величина λ в данном случае представляет собой совокупность тензорного индекса α и тройки пространственных координат x . Матричные элементы, фигурирующие в (4.2), суть

$$(\Phi_n, A_\alpha(x, x_0) \Phi_{n'}). \quad (5.28)$$

Они отличны от нуля, если числа фотонов в состояниях n и n' отличаются на единицу, и, следовательно, полюсы спектральной функции в данном случае определяют спектр «одетых» (т. е. взаимодействующих со своим окружением) фотонов. При этом, говоря о фотонах, мы имеем в виду не только обычные кванты поперечного электромагнитного поля, но и продольные кванты (в среде, а не в вакууме, они, вообще говоря, могут реально распространяться).

Затухание фотонов, как легко установить с помощью формулы (1.15), дается полюсами аналитического продолжения спектральной функции в нижнюю полуплоскость (при $\text{Re } E > 0$). Соответствующая функция Грина (с измененным — для удобства в дальнейшем — знаком) называется однофотонной; мы будем обозначать ее символом D . Так,

$$D_{c, \alpha\beta}(x, x') = -i \langle T \{ A_\alpha(x) A_\beta(x') \} \rangle. \quad (5.29)$$

Такие же обозначения мы будем использовать и для фононных функций Грина, имея в виду, что они не будут рассматриваться одновременно с фотонными. Можно было бы и эти функции называть однобозонными; мы, однако, сохраним это название лишь за «корпускулярными» функциями G , в отличие от «полевых» функций D . Заметим, что в рамках нерелятивистской теории различие между первыми и вторыми носит отнюдь не словесный характер: как мы увидим в следующей главе, функции G удовлетворяют дифференциальным уравнениям первого порядка по времени, а функции D — второго.

Для дальнейшего наиболее интересен будет пространственно однородный случай; тогда в соответствии с (5.6) мы имеем

$$D_{c, \alpha\beta}(x, x') = \int d\mathbf{k} d\omega e^{-i\omega(x_0 - x'_0) + i(\mathbf{k}, \mathbf{x} - \mathbf{x}')} D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega). \quad (5.30)$$

Очевидно, в силу бозевского характера эрмитовых операторов $A_\alpha(x)$ мы имеем (при вещественных $\mathbf{k}$ и ω)

$$D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = D_{c, \beta\alpha}(-\mathbf{k}, -\omega). \quad (5.31)$$

Пользуясь (5.31), дисперсионное соотношение (4.10) для данного случая можно переписать в несколько более удобном виде. Именно, представим интеграл, фигурирующий в (4.10), в виде суммы интегралов, взятых соответственно в пределах $(0, \infty)$ и $(-\infty, 0)$, и во втором из них произведем замену переменного: $E' \rightarrow -E'$. Принимая во внимание, что в данном случае $\eta = 1$, легко находим

$$\operatorname{Re} D_c(x, x; E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE'^2 \frac{1 - e^{-\beta E'}}{1 + e^{-\beta E'}} \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} D_c(x, x; E')}{E'^2 - E^2}. \quad (5.32)$$

Следует заметить, что в силу имеющейся в электродинамике возможности градиентного преобразования 4-потенциала функция (5.29) определена неоднозначно. Действительно, всегда возможна замена

$$A_i(x) \rightarrow A_i(x) + \frac{\partial f}{\partial x_i}, \quad A_0 \rightarrow A_0 + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial x_0}, \quad (5.33)$$

где f — произвольная скалярная дважды дифференцируемая функция.

Обозначим для удобства

$$k_0 = \frac{\omega}{c}, \quad k^2 = k_0^2 - \mathbf{k}^2.$$

Очевидно, при замене (5.33) фурье-образ $D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ преобразуется по закону

$$D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) \rightarrow D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) + k_\alpha k_\beta F(k^2), \quad (5.34)$$

где $F(k^2)$ очевидным образом связана с фурье-образом $f(x)$. В силу градиентной инвариантности электродинамики функция $F(k^2)$ должна выпасть (и фактически выпадает, см. [9]) из всех наблюдаемых величин, вычисляемых с помощью (5.30). Соответственно мы вправе подобрать ее так, чтобы функция $D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ имела наиболее удобный вид.

Заметим в связи с этим, что в изотропной системе вся «тензорная часть» $D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ может выражаться только через произведения $k_\alpha k_\beta$ и единичный тензор. Ограничимся в дальнейшем именно этим случаем. Тогда оказывается удобным положить

$$D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \left(g_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) D_c(\mathbf{k}, \omega), \quad (5.35)$$

где

$$g_{\alpha\beta} = g^{\alpha\beta} = 0, \alpha \neq \beta; g_{00} = -g_{11} = -g_{22} = -g_{33} = 1. \quad (5.36)$$

При этом, как легко убедиться, функция $D_{c, \alpha\beta}(x, x')$ удовлетворяет условию «типа Лоренца»

$$\frac{1}{c} \frac{\partial D_{c, 0\beta}(x, x')}{\partial x_0} - \frac{\partial D_{c, i\beta}(x, x')}{\partial x_i} = 0. \quad (5.37)$$

При проверке (5.37) следует принять во внимание известное из электродинамики (см. [9] и (I.33)) равенство

$$\langle [A_\alpha(x, x_0), A_\beta(x', x_0)]_- \rangle = 0.$$

Заметим, что формула (5.37) справедлива также для функций $D_{r, a}^{(-)}$.

Как мы увидим в гл. 2, условие (5.37) обеспечивает выполнение обычного электродинамического условия Лоренца для средних (фактически наблюдаемых) потенциалов электромагнитного поля, вычисленных с учетом взаимодействия с заряженными частицами. В этом и заключается смысл выбора (5.35).

Таким образом, градиентная инвариантность теории позволяет свести тензор $D_{c, \alpha\beta}$ к одной лишь скалярной функции, D_c .

В общей теории, развиваемой в следующих двух главах, мы не будем явно специализировать вида функции $D_{c, \alpha\beta}$ (исключая рассмотрение группы перенормировки, где будет использована форма (5.35)). При решении конкретных задач в гл. IV и V, однако, мы явно воспользуемся калибровкой (5.35).

Рассмотрим, наконец (подобно п. а), частный случай свободного электромагнитного поля в диэлектрической среде. Будем при этом пренебрегать тепловым излучением, не существенным в интересующих нас задачах. Тогда в отсутствие взаимодействия с заряженными частицами шпур в (5.29) сводится к среднему по основному состоянию (вакууму свободных фотонов); вид функции $D_c^{(0)}(k, \omega)$ хорошо известен из квантовой электродинамики (см. [9], а также приложение III):

$$D_c^{(0)}(k, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4 (k^2 - k_0^2 - i\epsilon)}. \quad (5.38)$$

В частности, в нерелятивистском приближении (т. е. в пренебрежении эффектами запаздывания электромагнитного поля) мы получаем

$$D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4 k^2}. \quad (5.39)$$

Как и должно быть, полюсы (5.38) лежат в точках $\omega = c|\mathbf{k}|$. С другой стороны, функция (5.39) не имеет полюсов в ω -плоскости (и вообще не зависит от ω). Это и понятно: формула (5.39) соответствует электростатическому приближению, принципиально исключающему электромагнитные волны в диэлектрике. Заметим, что в этой аппроксимации при $\alpha = \beta = 0$ вторым слагаемым в правой части (5.35) можно пренебречь и, следовательно,

$$D_{c,00}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega). \quad (5.40)$$

Обратим внимание на то, что с точностью до постоянного множителя правая часть (5.39) представляет собой трехмерный фурье-образ кулоновского потенциала $\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$. Это обстоятельство, как будет видно из дальнейшего (§ 8), не случайно.

ГЛАВА II

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА

§ 6. Уравнения движения и гамильтонианы

Уравнения для функций Грина мы получим, дифференцируя K_r , K_a , K_c по x_0 и пользуясь затем уравнениями движения для операторов C_1 и C_2 :

$$\frac{\partial C_l}{\partial x_0} = i(H'C_l - C_l H'), \quad l = 1, 2. \quad (6.1)$$

На основании (6.1) и определений (3.1) — (3.4) и (3.17) мы получаем

$$i \frac{\partial}{\partial x_0} \langle \langle C_1(x) | C_2(x') \rangle \rangle_j = -\delta(x_0 - x'_0) \langle C_1(x) C_2(x') \rangle - \langle \langle H'C_1(x) - C_1(x) H' | C_2(x') \rangle \rangle_j, \quad (6.2)$$

$$i \frac{\partial}{\partial x_0} \langle \langle C_1(x) | C_2(x') \rangle \rangle_j^{(\pm)} = -\delta(x_0 - x'_0) \langle [C_1(x), C_2(x')]_{\pm} \rangle - \langle \langle H'C_1(x) - C_1(x) H' | C_2(x') \rangle \rangle_j^{(\pm)}, \quad (6.3)$$

$$i \frac{\partial K_c(x, x')}{\partial x_0} = -\delta(x_0 - x'_0) \langle C_1(x) C_2(x') - \eta C_2(x') C_1(x) \rangle - i \langle T \{ H'C_1(x) - C_1(x) H', C_2(x') \} \rangle, \quad (6.4)$$

где индексы j , η имеют тот же смысл, что и в § 3. Из уравнений (6.2) — (6.4) видно известное практическое преимущество функций $K_j^{(\pm)}$ перед K_j : в первом случае дельта-функция $\delta(x_0 - x'_0)$ стоит множителем при коммутаторе или антикоммутаторе операторов C_1 и C_2 . При совпадении временных аргументов последний может оказаться дельтаобразным и по другим переменным, что заметно упрощает структуру уравнений.

Уравнения (6.2) — (6.4) удобны для исследования функций Грина, коль скоро волновые функции соответствующих частиц

В частности, в нерелятивистском приближении (т. е. в пренебрежении эффектами запаздывания электромагнитного поля) мы получаем

$$D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4 k^2}. \quad (5.39)$$

Как и должно быть, полюсы (5.38) лежат в точках $\omega = c|\mathbf{k}|$. С другой стороны, функция (5.39) не имеет полюсов в ω -плоскости (и вообще не зависит от ω). Это и понятно: формула (5.39) соответствует электростатическому приближению, принципиально исключающему электромагнитные волны в диэлектрике. Заметим, что в этой аппроксимации при $\alpha = \beta = 0$ вторым слагаемым в правой части (5.35) можно пренебречь и, следовательно,

$$D_{c,00}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega). \quad (5.40)$$

Обратим внимание на то, что с точностью до постоянного множителя правая часть (5.39) представляет собой трехмерный фурье-образ кулоновского потенциала $\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$. Это обстоятельство, как будет видно из дальнейшего (§ 8), не случайно.

ГЛАВА II

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА

§ 6. Уравнения движения и гамильтонианы

Уравнения для функций Грина мы получим, дифференцируя K_r , K_a , K_c по x_0 и пользуясь затем уравнениями движения для операторов C_1 и C_2 :

$$\frac{\partial C_l}{\partial x_0} = i(H'C_l - C_l H'), \quad l = 1, 2. \quad (6.1)$$

На основании (6.1) и определений (3.1) — (3.4) и (3.17) мы получаем

$$i \frac{\partial}{\partial x_0} \langle \langle C_1(x) | C_2(x') \rangle \rangle_j = -\delta(x_0 - x'_0) \langle C_1(x) C_2(x') \rangle - \langle \langle H'C_1(x) - C_1(x) H' | C_2(x') \rangle \rangle_j, \quad (6.2)$$

$$i \frac{\partial}{\partial x_0} \langle \langle C_1(x) | C_2(x') \rangle \rangle_j^{(\pm)} = -\delta(x_0 - x'_0) \langle [C_1(x), C_2(x')]_{\pm} \rangle - \langle \langle H'C_1(x) - C_1(x) H' | C_2(x') \rangle \rangle_j^{(\pm)}, \quad (6.3)$$

$$i \frac{\partial K_c(x, x')}{\partial x_0} = -\delta(x_0 - x'_0) \langle C_1(x) C_2(x') - \eta C_2(x') C_1(x) \rangle - i \langle T \{ H'C_1(x) - C_1(x) H', C_2(x') \} \rangle, \quad (6.4)$$

где индексы j , η имеют тот же смысл, что и в § 3. Из уравнений (6.2) — (6.4) видно известное практическое преимущество функций $K_j^{(\pm)}$ перед K_j : в первом случае дельта-функция $\delta(x_0 - x'_0)$ стоит множителем при коммутаторе или антикоммутаторе операторов C_1 и C_2 . При совпадении временных аргументов последний может оказаться дельтаобразным и по другим переменным, что заметно упрощает структуру уравнений.

Уравнения (6.2) — (6.4) удобны для исследования функций Грина, коль скоро волновые функции соответствующих частиц

удовлетворяют дифференциальным уравнениям первого порядка по времени. Так обстоит дело (в нерелятивистском случае) для любых частиц с конечной массой покоя. С другой стороны, электромагнитное и фононное поля описываются дифференциальными уравнениями второго порядка по времени. Соответственно и в уравнения для функций Грина оказывается удобным ввести вторые производные по времени (см. ниже, § 7).

Для явной записи уравнений (6.2) — (6.4) требуется задать не только конкретный вид операторов C_1 и C_2 , но и гамильтониан системы H' . Последний в общем случае имеет вид

$$H' = H'_p + H_{\text{int}} + H_f + H_{pf} \quad (6.5)$$

Здесь H'_p есть аддитивный гамильтониан системы невзаимодействующих частиц, движущихся в некотором классическом внешнем поле (с учетом члена $-\mu N$); H_{int} — гамильтониан прямого (обычно парного) взаимодействия между частицами; H_f — гамильтониан свободного квантового поля (или полей); H_{pf} — гамильтониан взаимодействия частиц с квантовым полем (полями).

Заметим, что, строго говоря, достаточно было бы принимать во внимание только взаимодействие с квантовыми полями; прямое взаимодействие между частицами получилось бы отсюда как следствие (так же, например, как получается закон Кулона в квантовой электродинамике). Практически, однако, в ряде задач удобнее сразу рассматривать прямое взаимодействие. Именно, так обстоит дело во всех случаях, когда можно пренебречь запаздыванием взаимодействия через поле и когда при этом кванты поля участвуют только в виртуальных процессах, а реальное поглощение и испускание их не существенно.

Обозначим через T и V операторы кинетической и потенциальной энергии частиц в классическом внешнем поле. Тогда

$$H'_p(x_0) = \int d\lambda d\lambda' (\lambda | T + V - \mu | \lambda') \bar{a}(\lambda, x_0) a(\lambda', x_0). \quad (6.6)$$

В частности, может оказаться удобным работать в представлении, в котором оператор $T + V - \mu N$ диагонален. Обозначим его собственные значения через $E(\lambda)$; тогда

$$H'_p(x_0) = \int d\lambda E(\lambda) \bar{a}(\lambda, x_0) a(\lambda, x_0). \quad (6.7)$$

Пусть, далее, бинарный оператор энергий прямого взаимодействия между частицами есть U . Тогда

$$H_{\text{int}}(x_0) = \frac{1}{2} \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda'_1 d\lambda'_2 (\lambda_1, \lambda_2 | U | \lambda'_2, \lambda'_1) \bar{a}(\lambda_1, x_0) \times \\ \times \bar{a}(\lambda_2, x_0) a(\lambda'_1, x_0) a(\lambda'_2, x_0). \quad (6.8)$$

В фермиевском случае, когда операторы $a(\lambda, x_0)$ и $a(\lambda', x_0)$ антикоммутируют, функцию $(\lambda_1, \lambda_2 | U | \lambda'_2, \lambda'_1)$ будем считать антисимметризованной относительно перестановок $\lambda_1 \leftrightarrow \lambda_2$ и $\lambda'_1 \leftrightarrow \lambda'_2$ (в бозевском случае эта функция симметрична).

В координатном представлении большинство недиагональных элементов U обычно исчезает, и мы имеем

$$H_{\text{int}}(x_0) = \frac{1}{2} \int dx dx' \bar{a}(x) \bar{a}(x') U(x-x') a(x') a(x). \quad (6.8a)$$

Заметим, что поскольку полный гамильтониан есть интеграл движения, безразлично, к какому именно моменту времени его относить: следует лишь относить к этому моменту все слагаемые в (6.5), ибо порознь они, вообще говоря, отнюдь не сохраняются. Удобнее всего выбрать тот же момент x_0 , к которому относится оператор $C_1(x)$ в (6.2) — (6.4).

Операторы H_f , H_{pf} удобно сначала написать для конкретных случаев, с которыми мы только и будем иметь дело.

а) Заряженные частицы в электромагнитном поле. Как известно из квантовой электродинамики [1], гамильтониан свободного электромагнитного поля можно написать в виде¹⁾

$$H_f(x_0) = -\frac{1}{2} \int dx \sum_a g^{aa} : \left\{ \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial A_a(x)}{\partial x_0} \right)^2 + \right. \\ \left. + \sum_{i=1, 2, 3} \left(\frac{\partial A_a(x)}{\partial x_i} \right)^2 \right\} :. \quad (6.9)$$

Здесь символ $: \{ \dots \} :$ означает, что в соответствующем выражении все операторы порождения фотонов должны стоять слева от операторов уничтожения. Произведение, упорядоченное

¹⁾ В интегральном смысле эта формула эквивалентна обычному выражению $H_f = \frac{1}{2} \int (E^2 + H^2) dx$.

таким образом, называется нормальным [1] (см. также приложение I).

Гамильтониан взаимодействия поля с заряженными частицами (также в координатном представлении) имеет вид [1]

$$H_{pf}(x_0) = -e \int dx \bar{a}(x) \gamma^a(x) A_a(x), \quad (6.10)$$

где γ — матрицы Дирака. Мы не ставим здесь знака нормального произведения ферми-операторов, так как в рассматриваемых нами задачах никакого ненаблюдаемого фона не будет. Заметим, что, интересуясь лишь процессами с участием виртуальных фотонов (и в пренебрежении величинами порядка $1/c$), можно заменить (6.10) прямым кулоновским взаимодействием между электронами, т. е. формулой типа (6.8) с кулоновским потенциалом в качестве U .

б) Электроны в фононном поле. Обозначим через $\bar{\xi}(\nu)$ и $\xi(\nu)$ операторы порождения и уничтожения фононов типа ν , а через $\omega(\nu)$ — их энергию (символ ν представляет собой совокупность трех компонент квазимоментного вектора $\mathbf{k}$ и индекса, указывающего ветвь фононного спектра). Тогда гамильтониан свободного фононного поля будет

$$H_f(x_0) = \sum_{\nu} \omega(\nu) \bar{\xi}(\nu, x_0) \xi(\nu, x_0). \quad (6.11)$$

Как всегда в подобных случаях, сумма $\sum_{\nu}$ может обозначать и интеграл по непрерывным переменным, входящим в состав ν ; удобно, однако, сделать компоненты $\mathbf{k}$ дискретными, рассматривая систему фононов в большом кубе объема V и накладывая условия периодичности на границах куба.

Гамильтониан взаимодействия фононов с электронами запишем в виде

$$H_{pf}(x_0) = -g \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{p}', s} \frac{1}{V} \times \\ \times \{ f(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \mathbf{k}) \xi(\mathbf{k}, x_0) \bar{a}(\mathbf{p}, s, x_0) a(\mathbf{p}', s, x_0) + \\ + \bar{f}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \mathbf{k}) \bar{\xi}(\mathbf{k}, x_0) \bar{a}(\mathbf{p}', s, x_0) a(\mathbf{p}, s, x_0) \}. \quad (6.12)$$

Здесь $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ — квазиимпульсы электрона в кристаллической решетке, s — спиновая координата, операторы ξ и $\bar{\xi}$ относятся к продольным фононам (акустическим или оптическим). Вели-

чина g есть константа связи. Она имеет различный вид для полупроводников и для металлов (подробнее см. §§ 26, 27). Функция $f(\mathbf{k})$ различна для акустических и оптических фононов. Именно, для длинноволновых фононов ($k \rightarrow 0$)

$$f_{\text{акуст}} = i \frac{|\mathbf{k}|}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}}, \quad (6.13)$$

$$f_{\text{оптнч}} = \frac{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}}{|\mathbf{k}|}. \quad (6.14)$$

Выражение (6.12) соответствует простейшей аппроксимации, когда взаимодействие электронов с фононами считается изотропным и, кроме того, не принимаются во внимание процессы переброса. Обобщение на более сложные случаи не представляет труда, но в этой книге оно нам не понадобится.

В определенных предположениях выражение (6.12) можно заменить гамильтонианом типа (6.8), т. е. исключить из явного рассмотрения фононное поле, введя взамен прямое взаимодействие между электронами [23]. Соответствующий оператор H_{int} называется гамильтонианом Бардина и имеет вид

$$H_{\text{int}} = \frac{B}{2V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \bar{a}(\mathbf{p}, s, x_0) \bar{a}(-\mathbf{p}, -s, x_0) \times \\ \times a(-\mathbf{p}', -s, x_0) a(\mathbf{p}', s, x_0), \quad (6.15)$$

где B — некоторая постоянная.

Заметим далее, что выражения (6.10) и (6.12) можно записать единым образом. Действительно, введем «потенциал квантового поля» $\Phi(\mathbf{x}, x_0)$ (он может зависеть еще от дискретных, например векторных, индексов, которые мы явно не указываем). В случае электромагнитного поля $\Phi(\mathbf{x}, x_0)$ представляет собой совокупность четырех компонент $A_\alpha(x)$. В случае фононного поля, переходя в (6.12) к координатному представлению, легко получить

$$\Phi(\mathbf{x}, x_0) = \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{\mathbf{k}} \{f(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \xi(\mathbf{k}, x_0) + \bar{f}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \bar{\xi}(\mathbf{k}, x_0)\}. \quad (6.16)$$

Тогда в обоих случаях мы имеем (в электродинамике константа связи $g = e$)

$$H_{pf}(x_0) = -g \int dx \bar{a}(x) \Gamma^{(0)} a(x) \Phi(x), \quad (6.17)$$

где

$$\Gamma^{(0)} = \begin{cases} \gamma^a & \text{— в электродинамике,} \\ 1 & \text{— в теории фононного поля.} \end{cases} \quad (6.18)$$

Величина $\Gamma^{(0)}$ называется элементарной вершинной частью. Название связано со специальным приемом графического изображения уравнений для функций Грина (см. приложение I).

Не представляет труда обобщить все дальнейшие рассуждения (§§ 7—9) и на более общий нелокальный случай, когда матрица $\Gamma^{(0)}$ в (6.17) не диагональна не только по спиновым, но и по пространственным координатам (соответственно все операторы берутся в разных точках, и число интегралов в (6.17) утраивается).

«Координатная» форма записи (6.17) оказывается весьма удобной (хотя, конечно, и не обязательной) при формулировке и исследовании уравнений в вариационных производных (см. ниже §§ 8—10). Она в равной мере применима и к любым другим полям; в частности, тензорная размерность Φ и $\Gamma^{(0)}$ никак не специализируется (с тем лишь очевидным условием, чтобы произведение $\Gamma^{(0)}\Phi$ было инвариантно относительно преобразований симметрии, допустимых в данной системе).

в) Спиновая система в ферромагнетике. Для полноты приведем еще гамильтониан, с которым приходится иметь дело при рассмотрении ферромагнитных явлений (гамильтониан Гейзенберга). Обозначим через $\bar{b}(f)$ и $b(f)$ операторы Паули, зависящие от координат узла решетки f . Пусть, далее, $A(f_1 - f_2)$ есть обменный интеграл для электронов, находящихся в узлах f_1 и f_2 , а

$$A'(k) = \sum_f A(f) e^{ikf}$$

— его фурье-образ, k — волновой вектор.

Пусть, наконец, $\mathcal{H}$ обозначает напряженность внешнего магнитного поля, а μ_B — магнетон Бора. Тогда гамильтониан

Гейзенберга имеет вид

$$H = C + [2\mu_B \mathcal{H} + 2A'(0)] \sum_f n(f) - 2 \sum_{f_1, f_2} A(f_1 - f_2) \times \\ \times \bar{b}(f_1) b(f_2) - 2 \sum_{f_1, f_2} A(f_1 - f_2) n(f_1) n(f_2). \quad (6.19)$$

Здесь

$$n(f) = \bar{b}(f) b(f), \quad C = -\frac{1}{2} N A'(0) - N \mu_B \mathcal{H},$$

N — общее число узлов решетки. Относительно вывода гамильтониана (6.19) см., например, работы [3], [24], [25].

§ 7. Цепочки уравнений для двухвременных функций Грина¹⁾

Запишем теперь в явном виде уравнения (6.2) — (6.4) для некоторых простейших функций Грина. Ограничимся здесь только системами ферми-частиц. Случай, когда $\bar{a}$ и a суть операторы Паули, рассмотрен в гл. VII; перенос результатов этого и следующего параграфов на случай систем бозе-частиц требует лишь изменения знаков в некоторых промежуточных формулах.

Пусть для начала мы имеем систему ферми-частиц с прямым взаимодействием. Рассмотрим уравнение для однофермионной функции Грина, полагая $C_1(x) = a(\lambda, x_0)$, $C_2(x') = \bar{a}(\lambda', x'_0)$. Для операторов a , $\bar{a}$, взятых в один и тот же момент времени, справедливы обычные правила перестановки²⁾

$$\left. \begin{aligned} a(\lambda, x_0) \bar{a}(\lambda', x_0) + \bar{a}(\lambda', x_0) a(\lambda, x_0) &= \delta(\lambda - \lambda'), \\ a(\lambda, x_0) a(\lambda', x_0) + a(\lambda', x_0) a(\lambda, x_0) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.1)$$

Пользуясь равенствами (7.1), (6.6) и (6.8) и принимая во внимание свойство антисимметрии матричных элементов

¹⁾ См. [7].

²⁾ Как всегда в таких случаях, символ $\delta(\lambda - \lambda')$ означает произведение δ -функций от непрерывных параметров и дельта-символов Кронекера от дискретных параметров, входящих в состав λ .

оператора U [см. замечание после формулы (6.8)], легко находим

$$[H'_p(x_0), a(\lambda, x_0)]_- = \mu a(\lambda, x_0) - \int d\lambda' (\lambda | T + V | \lambda') a(\lambda'), \quad (7.2)$$

$$[H_{\text{int}}(x_0), a(\lambda, x_0)]_- =$$

$$= - \int d\lambda' d\lambda'' d\lambda''' (\lambda, \lambda' | U | \lambda''', \lambda'') \bar{a}(\lambda') a(\lambda'') a(\lambda'''). \quad (7.3)$$

Из соотношений (7.1) видно, что в данном случае выгодно наряду с G_c рассматривать функции $G_r^{(+)}$ и $G_a^{(+)}$ [см. замечание после уравнений (6.2) — (6.4)]. Действительно, тогда первые слагаемые в правых частях (6.3) и (6.4) становятся дельтаобразными как по $x_0 - x'_0$, так и по $\lambda - \lambda'$. В то же время уравнения для функций $G_{r,a}^{(-)}$ и $G_{r,a}$ имеют несколько более сложный вид. Разумеется, окончательный результат, например, для энергетического спектра системы получается одним и тем же при использовании любых уравнений (6.2) — (6.4). Мы имеем в виду лишь формальное упрощение вычислений. Введем «двухчастичные» функции Грина, полагая

$$G_{2,r}^{(+)}(\lambda', \lambda'', \lambda''', x_0; \lambda_1, x'_0) = i\theta(x_0 - x'_0) \langle [\bar{a}(\lambda', x_0) a(\lambda'', x_0) a(\lambda''', x_0), \bar{a}(\lambda_1, x'_0)]_+ \rangle, \quad (7.4)$$

$$G_{2,a}^{(+)}(\lambda', \lambda'', \lambda''', x_0; \lambda_1, x'_0) = -i\theta(x'_0 - x_0) \langle [\bar{a}(\lambda', x_0) a(\lambda'', x_0) a(\lambda''', x_0), \bar{a}(\lambda_1, x'_0)]_+ \rangle, \quad (7.5)$$

$$G_{2,c}(\lambda', \lambda'', \lambda''', x_0; \lambda_1, x'_0) = i \langle T \{ \bar{a}(\lambda', x_0) a(\lambda'', x_0) a(\lambda''', x_0) \bar{a}(\lambda_1, x'_0) \} \rangle. \quad (7.6)$$

Эти функции суть частные случаи общей двухчастичной функции Грина, зависящей от четырех времен. Другой частный случай дается формулой (5.24). Уравнения (6.3) — (6.4) для функций $G_r^{(+)}$, $G_a^{(+)}$ и G_c теперь примут вид

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial x_0} G(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) + \mu G(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) - \\ - \int d\lambda_1 (\lambda | T + V | \lambda_1) G(\lambda_1, x_0; \lambda', x'_0) - \\ - \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 (\lambda, \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2) G_2(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, x_0; \lambda', x'_0) = \\ = -\delta(x_0 - x'_0) \delta(\lambda - \lambda'). \end{aligned} \quad (7.7)$$

В частности, в координатном представлении для системы с силами, не зависящими от спинов, мы получаем

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) \right\} G(x, x') - \\ - \int dx'' U(x - x'') G_2(x'', x'', x, x_0; x', x'_0) = -\delta(x - x'), \quad (7.7a)$$

где $U(x)$ — обычная потенциальная энергия взаимодействия, причем $U(x) = U(-x)$. Мы сознательно опустили все индексы у функций G и G_2 , ибо уравнения, связывающие $G_r^{(+)}$ с $G_{2,r}^{(+)}$, $G_a^{(+)}$ с $G_{2,a}^{(+)}$ и G_c с $G_{2,c}$, оказываются совершенно идентичными.

Для системы бозе-частиц получаются в точности такие же уравнения, но вместо функций $G_{r,a}^{(+)}$ и $G_{2,r,a}^{(+)}$ следует брать $G_{r,a}^{(-)}$ и $G_{2,r,a}^{(-)}$. Это относится и к приводимым ниже уравнениям [(7.10) и т. д.].

В левой части (7.7), помимо искомой функции Грина G , фигурирует также «двухчастичная» функция G_2 . Уравнение для нее составляется совершенно аналогичным образом, и легко усмотреть, что в него, помимо G_2 , войдет также «трехчастичная» функция Грина G_3 , содержащая уже шесть операторов $\bar{a}$, a под знаком усреднения. Продолжая этот процесс, получим бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений. Естественно, наряду с (7.7) и т. д. надо рассматривать и цепочку сопряженных уравнений, получающихся при дифференцировании G , G_2 , ... по x'_0 (а не по x_0). В дальнейшем мы, как правило, не будем явно оговаривать это обстоятельство, лишь подразумевая его. По структуре левых частей цепочка уравнений для функций Грина вполне аналогична цепочке уравнений для частных функций распределения, найденной в работах [2], [3]. Разница состоит в том, что в нашем случае искомые функции зависят от двух времен и система не однородна. Последнее обстоятельство связано с наличием у рассматриваемых функций особенностей при совпадении временных аргументов, т. е. именно с тем, что позволило нам в §§ 4, 5 расширить определение спектральных функций на всю комплексную плоскость. Мы увидим, что это действительно весьма облегчает решение конкретных задач. Появление таких цепочек типично для любого

метода решения задачи многих тел и, по-видимому, в той или иной форме неизбежно. Действительно, оно отражает лишь невозможность точной изоляции некоторой группы частиц от всего остального коллектива при наличии взаимодействия между ними. Как правило, точное решение таких бесконечных систем оказывается невозможным, и приходится «расцеплять» цепочку тем или иным приближенным методом (например, предполагая, что n -я функция Грина определенным образом выражается через функции низших порядков). Именно здесь, как уже указывалось, вступают в силу различные аппроксимации, которые имеет смысл рассматривать не в общем виде, а применительно к той или иной конкретной задаче (см. гл. IV—VII).

Как видно из (7.7), функции $G_r^{(+)}$, $G_a^{(+)}$ и G_c суть решения одной и той же системы уравнений, удовлетворяющие различным граничным условиям по t . Вид этих граничных условий формально может быть получен из определений (3.1) — (3.4) и (3.17); однако непосредственная формулировка их как условий, накладываемых на искомые функции при $x_0 - x'_0 \rightarrow \pm\infty$ или при $x_0 - x'_0 \rightarrow 0$, не всегда удобна. Фактически, однако, такая формулировка и не обязательна, ибо она эквивалентна тому или иному выбору полученных в §§ 3—5 спектральных представлений или дисперсионных соотношений. Действительно, как видно, например, из вывода формул (3.7) и (3.8), та или иная комбинация θ -функций от $x_0 - x'_0$ однозначно предопределяет то или иное правило обхода полюсов в подынтегральных выражениях (подробнее см. § 10). Таким образом, чтобы удовлетворить граничным условиям, достаточно потребовать, чтобы искомая функция допускала спектральное представление должного вида. Практически удобнее всего будет воспользоваться дисперсионными соотношениями типа (4.7), (4.8), (4.10).

Наконец, заметим, что уравнение (7.7) отличается от уравнения движения для матричных элементов оператора $a(\lambda, x_0)$ (в представлении Гейзенберга) только наличием неоднородного члена в правой части. Этот факт отнюдь не случаен. Он вытекает из самой структуры выражений (3.1) — (3.4) и (3.17), отличающихся от средних значений $\langle C_1(x) C_2(x') \rangle$ лишь наличием разрывных множителей, дифференцирование которых и дает дельтаобразные неоднород-

ности. Именно это обстоятельство и дает основание называть выражения (3.1) — (3.4) и (3.17) функциями Грина. Мы действительно имеем дело здесь с функциями Грина (для уравнений Шредингера, Максвелла и т. д.) в обычном математическом смысле этого слова.

Совершенно аналогично обстоит дело и при взаимодействии частиц с квантовым полем. (Мы воспользуемся здесь координатным представлением.) На основании (7.1) и (6.17) имеем

$$[H_{pf}(x_0), a(x, x_0)]_- = g\Gamma^{(0)} a(x) \Phi(x). \quad (7.8)$$

Введем теперь «смешанные» фермионно-бозонные функции Грина вида

$$R_c(s, x, x_0; s', x', x'_0) = i \langle T \{ a(s, x) \bar{a}(s', x') \Phi(x) \} \rangle \quad (7.9)$$

(аналогично по типу (3.1) — (3.4) вводятся и функции $R_r^{(\pm)}$ и т. д.).

Тогда для функций $G_r^{(+)}$, $G_a^{(+)}$ и G_c получим единое уравнение

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu \right) G(s, x; s', x') - (s | T_x + V(x) | s'') G(s'', x; s', x') + + g\Gamma^{(0)}(s, s'') R(s'', x; s', x') = -\delta(x_0 - x'_0) \delta(x - x') \delta_{ss'}. \quad (7.10)$$

Здесь принято во внимание, что в координатном представлении T_x есть дифференциальный оператор (Дирака или Шредингера — судя по характеру задачи), а матрица $(x | V | x')$ диагональна. Вместе с тем, мы не предполагаем диагональности V по спиновым переменным, сохраняя возможность учета спиновых взаимодействий. В дальнейшем мы, как правило, не будем явно указывать спиновые индексы, имея в виду соответствующее матричное перемножение.

Наряду с однофермионной в данном случае надлежит ввести еще однобозонную функцию Грина, определив ее соотношением типа (5.29)

$$D_c(x, x') = -i \langle T \{ \Phi(x) \Phi(x') \} \rangle \quad (7.11)$$

(аналогично $D_r^{(-)}$, $D_a^{(-)}$ и т. д.).

Уравнение движения для D_c легко найти с помощью соотношения (6.1) и правил перестановки для операторов $\Phi(x)$. Рассмотрим сначала конкретные примеры взаимодействия

фермионов с электромагнитным полем и с полем акустических фононов.

В первом случае правила перестановки для операторов $A_\alpha(x)$, $A_\beta(x')$, взятых в один и тот же момент времени, имеют вид (см. приложение I)

$$\begin{aligned} [A_\alpha(x, x_0), A_\beta(x', x_0)]_- &= 0, \\ \left[\frac{\partial A_\alpha(x, x_0)}{\partial x_0}, A_\beta(x', x_0) \right]_- &= ic^2 g_{\alpha\beta} \delta(x - x'), \quad (7.12) \\ \left[\frac{\partial A_\alpha(x, x_0)}{\partial x_i}, A_\beta(x', x_0) \right]_- &= 0. \end{aligned}$$

С помощью (6.9), (6.10) и (7.12) легко убедиться, что уравнение (6.1) для оператора $A_\alpha(x)$ дает просто тождество: $\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_0} = \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_0}$ (это и означает, что в данном случае уравнение движения для A_α и, следовательно, для D_c — не первого, а более высокого порядка по времени). Применяя далее (6.1) к оператору $\frac{\partial A_\alpha(x)}{\partial x_0}$ и вновь пользуясь правилами перестановки (7.12) и формулами (6.9), (6.10), без труда получаем

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A_\alpha(x)}{\partial x_0^2} - \nabla_x^2 A_\alpha(x) = -e g_{\alpha\beta} \bar{a}(x) \gamma^\beta a(x). \quad (7.13)$$

Это, как и следовало ожидать, есть обычное уравнение Даламбера с квантовым током в правой части. Для $D_c(x, x')$ мы получаем на основании (7.11) и (7.12)

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{c, \alpha\beta}(x, x')}{\partial x_0} &= -i \left\langle T \left\{ \frac{\partial A_\alpha(x)}{\partial x_0}, A_\beta(x') \right\} \right\rangle, \\ \frac{\partial^2 D_{c, \alpha\beta}(x, x')}{\partial x_0^2} &= c^2 g_{\alpha\beta} \delta(x - x') - i \left\langle T \left\{ \frac{\partial^2 A_\alpha(x)}{\partial x_0^2}, A_\beta(x') \right\} \right\rangle. \end{aligned}$$

Принимая во внимание (7.13), находим окончательно

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} - \nabla_x^2 \right) D_{c, \alpha\beta}(x, x') - \\ - i e g_{\alpha\lambda} \langle T \{ \bar{a}(x) \gamma^\lambda a(x) A_\beta(x') \} \rangle = g_{\alpha\beta} \delta(x - x'). \quad (7.14) \end{aligned}$$

Заметим, что при проверке уравнения (7.14) для того или иного явного вида $D_c(x, x')$ следует соблюдать осторожность. Так, если для свободного поля подставить сюда выраже-

ния (5.30), (5.35) и выполнить дифференцирование под знаком интеграла, то в правой части можно получить дополнительные члены типа $\delta''(x - x')$. Это обстоятельство связано с сингулярностью T -произведения при совпадении временных аргументов (или, что сводится к тому же, с расходимостью получающегося интеграла) и означает лишь недопустимость такой процедуры.

Обратимся теперь ко второму случаю — взаимодействию электронов с акустическими фононами. Правила перестановки для операторов $\bar{\Phi}(x)$ легко найти, пользуясь выражением (6.16) и правилами перестановки для ξ , $\bar{\xi}$:

$$\left. \begin{aligned} \xi(k) \bar{\xi}(k') - \bar{\xi}(k') \xi(k) &= \delta(k - k'), \\ \xi(k) \xi(k') - \xi(k') \xi(k) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.15)$$

Таким путем получаем

$$\left. \begin{aligned} [\Phi(x, x_0), \Phi(x', x_0)]_- &= 0, \\ \left[\Phi(x', x_0), \frac{\partial \Phi(x, x_0)}{\partial x_0} \right]_- &= -i \nabla_x^2 \delta(x - x'). \end{aligned} \right\} \quad (7.16)$$

Вычисляя с помощью (6.1), (6.17), (6.11) и (7.16) произвольную $\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x_0}$, вновь убеждаемся, что уравнение (6.1) в применении к $\Phi(x)$ в данном случае обращается в тождество $\frac{\partial \Phi}{\partial x_0} = \frac{\partial \Phi}{\partial x_0}$. Соответственно применим (6.1) к оператору $\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x_0}$; это дает

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x_0^2} = & -\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \omega^2(k) \{ f(k) e^{ikx} \xi(k, x_0) + \\ & + \bar{f}(k) e^{-ikx} \bar{\xi}(k, x_0) \} - g \nabla_x^2 \bar{a}(x) \Gamma^{(0)} a(x). \end{aligned} \quad (7.17)$$

Первое слагаемое в правой части (7.17) можно преобразовать, вводя оператор $\omega^2(-i\nabla_x)$; по определению

$$\omega^2(-i\nabla_x) e^{ikx} = \omega^2(k) e^{ikx}. \quad (7.18)$$

Поскольку $\omega(k)$ есть четная функция, изучаемое выражение принимает вид

$$-\omega^2(-i\nabla_x) \bar{\Phi}(x). \quad (7.19)$$

С помощью (7.16), (7.17) и (7.19) немедленно находим уравнение для $D_c(x, x')$:

$$\frac{\partial^2 D_c(x, x')}{\partial x_0^2} + \omega^2 (-i\nabla_x) D_c(x, x') - \\ - ig\nabla_x^2 \langle T \{ \bar{a}(x) \Gamma^{(0)} a(x) \Phi(x') \} \rangle = \nabla_x^2 \delta(x - x'). \quad (7.20)$$

Теперь легко написать уравнение движения для $D_c(x, x')$ в общем виде, справедливым для любого бозевского поля¹⁾, взаимодействующего с фермионами по закону (6.17). Для этой цели заметим, что дифференциальные операторы, действующие на $D_c(x, x')$ в левых частях (7.14) и (7.20), определяют уравнения движения соответствующих свободных полей; с другой стороны, множители (вообще говоря, операторные), стоящие при δ -функции и при средних значениях тройных произведений, обусловлены как видом перестановочных соотношений для операторов поля $\Phi(x)$, так и видом гамильтониана взаимодействия. Из структуры уравнений явствует, что так же будет обстоять дело и в общем случае (от конкретной природы поля зависит лишь явный вид названных операторов). Обозначим дифференциальный оператор, фигурирующий в уравнении движения свободного бозевского поля, через $L(x) = \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} - L(x)$, а множитель при δ -функции и

при тройном произведении — через $f(x)$. Введем, далее, еще одну «смешанную» функцию Грина

$$Q_c(s, s', x, x') = i \langle T \{ a(s, x) \bar{a}(s', x) \Phi(x') \} \rangle. \quad (7.21)$$

(Она отличается от R_c другим распределением операторов Φ и $\bar{a}$ по моментам времени; аналогично вводятся и функции $Q_r^{(-)}$, $Q_a^{(-)}$ и т. д.)

Тогда общее уравнение для $D_c(x, x')$ можно записать в виде

$$L(x) D_c(x, x') + gf \text{Sp} \Gamma^{(0)} Q_c(x, x') = f \delta(x - x'). \quad (7.22)$$

Здесь шпур берется по спиновым переменным; величины f , $\Gamma^{(0)}$ и Q_c могут иметь и векторные индексы. В согласии с (7.14) и (7.20) оператор f в электродинамике и в теории

¹⁾ Имеются в виду поля, для которых не имеет места закон сохранения числа квантов [как это ясно видно из (6.17)].

фононного поля имеет вид соответственно c^2 и ∇_x^2 («единичная» матрица в электродинамике есть $g_{\alpha\beta}$).

Такие же уравнения получаются и для функций $D_{r,a}^{(-)}$ и $Q_{r,a}^{(-)}$.

В тех случаях, когда f есть дифференциальный оператор, уравнение (7.22) отличается по виду от обычного уравнения для функции Грина, ибо содержит в правой части не просто δ -функцию, а производные от нее. Легко, однако, получить и уравнение обычного типа, полагая

$$D_c(x, x') = f \Delta_c(x, x'), \quad (7.23)$$

где $\Delta_c(x, x')$ — некоторая новая функция. Для нее мы получаем в силу (7.22) и (7.23)

$$L(x) \Delta_c(x, x') + g \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} Q_c(x, x') = \delta(x - x'). \quad (7.24)$$

Таким образом, в данном случае правильнее было бы называть функцией Грина не D_c , а вспомогательную величину Δ_c ; функция же D_c получается из Δ_c с помощью дифференциального оператора f . Очевидно, для Δ_c справедливы спектральные представления и дисперсионные соотношения, установленные ранее для D_c . Мы, однако, сохраним за D_c название «функция Грина», имея в виду, что это не может повести к каким-либо недоразумениям по существу.

Функцию Δ_c для фононного поля легко связать со средними значениями операторов ξ , $\bar{\xi}$. Так, для акустических фононов на основании (6.13), (6.16) и (7.23) мы получаем

$$\begin{aligned} \Delta_c(x, x') = \frac{i}{2V} \sum_k \omega^{-1}(k) e^{i(k, x-x')} \{ T \{ \xi(k, x_0) \bar{\xi}(k, x'_0) + \\ + \bar{\xi}(-k, x_0) \xi(-k, x'_0) - \xi(k, x_0) \xi(-k, x'_0) - \\ - \bar{\xi}(-k, x_0) \bar{\xi}(k, x'_0) \} \}. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Легко видеть, что эта величина имеет не только вспомогательное, но и самостоятельное значение: в этом случае правая часть (6.12) с точностью до множителя $g \sqrt{V\rho}$ (ρ — плотность кристалла) представляет собой дивергенцию вектора u — вектора смещения атомов решетки из положения равновесия. Соответственно выражение (7.25) определяет временную

корреляционную функцию и (при $x'_0 = x_0$) среднее значение произведения продольных компонент u .

В некоторых задачах, например при вычислении термодинамического потенциала фононов, оказывается удобным вместо (7.11) ввести функцию Грина непосредственно для самих операторов ξ , $\bar{\xi}$, полагая

$$F_c(\mathbf{k}, t) = -i \langle T \{ \xi(\mathbf{k}, x_0) \bar{\xi}(\mathbf{k}, x'_0) \} \rangle \quad (7.26)$$

(аналогично $F_r^{(-)}$).

Для определения энергетического спектра системы функция F_c дает то же, что и D_c , и для нее справедливы спектральные представления того же типа. Уравнения для функций F_c , $F_r^{(-)}$, $F_a^{(-)}$ составляются по той же схеме, что и описанная выше.

Аналогичным путем составляются и уравнения для «смешанных» функций Грина R и Q . В них войдут функции Грина еще более высоких порядков, т. е., как и в случае систем с прямым взаимодействием, мы получаем здесь, вообще говоря, бесконечную систему зацепляющихся уравнений. Граничные условия к ним также удобнее всего сформулировать в виде дисперсионных соотношений типа (4.7), (4.8) и (4.10).

§ 8. Уравнения в функциональных производных¹⁾

При фактическом решении систем типа (7.7), (7.10), (7.22) всегда приходится «расцеплять» цепочку с помощью того или иного приближенного приема. Уже по этой причине весьма полезно иметь различные представления для исследуемых уравнений. В настоящем параграфе будет показано, что в случае причинных функций Грина уравнения типа (7.10), (7.22) можно записать в весьма компактном виде, вводя в рассмотрение функциональные производные от искомых величин по некоторым вспомогательным аргументам. Мы проведем явные выкладки для системы ферми-частиц; впоследствии (в § 9) будут указаны изменения, которые следует внести при переходе к бозе-системе. Несколько иным путем, не выходя за пределы «двухвременных» структур, можно

¹⁾ См. [5], [6], [8].

переписать в функциональных производных и уравнения для опережающих и запаздывающих функций Грина.

Обратимся прежде всего к уравнению (7.10) и рассмотрим несколько внимательнее фигурирующую там функцию $R_c(x, x')$ (7.9) (мы не выписываем явно спиновых и других дискретных переменных, считая все величины соответствующими матрицами):

$$R_c(x, x') = i \langle T \{ a(x) \bar{a}(x') \Phi(x) \} \rangle.$$

Задача состоит в том, чтобы представить это выражение как некоторую операцию над G_c (или над связанными с ней функциями). Для этой цели введем (чисто формально) величины

$$G_c(x, x'; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x) \bar{a}(x') S \} \rangle, \quad (8.1)$$

$$R_c(x, x'; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x) \bar{a}(x') \Phi(x) S \} \rangle, \quad (8.2)$$

$$S = T \left\{ \exp i \int dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz_0 J(z) \Phi(z) \right\}. \quad (8.3)$$

Здесь J — некоторая классическая функция, трансформационные свойства которой обеспечивают инвариантность произведения $J\Phi$ относительно допустимых в данной системе преобразований симметрии (так, в электродинамике J есть 4-вектор с компонентами J^0, J^i , где $J^0 = \rho$ — «классическая внешняя плотность заряда», J — вектор «классической внешней плотности тока», деленный на c).

Очевидно,

$$G_c(x, x') = \lim_{J \rightarrow 0} G_c(x, x'; J),$$

$$R_c(x, x') = \lim_{J \rightarrow 0} R_c(x, x'; J)$$

и

$$\begin{aligned} R_c(x, x'; J) &= - \frac{i}{\langle S \rangle} \frac{\delta \langle S \rangle G_c(x, x'; J)}{\delta J(x)} = \\ &= -i \frac{\delta G_c(x, x'; J)}{\delta J(x)} - i G_c(x, x'; J) \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)}. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Уравнение для функции $G_c(x, x'; J)$ легко получить, принимая во внимание, что операторы Φ и a , взятые в один

и тот же момент времени, по определению коммутируют. Подставляя (8.4) в (7.10), мы получаем

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu \right) G_c(x, x'; J) - \\ & - [T_x + V(x)] G_c(x, x'; J) - ig\Gamma^{(0)} \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)} G_c(x, x'; J) - \\ & - ig\Gamma^{(0)} \frac{\delta G_c(x, x'; J)}{\delta J(x)} = -\delta(x - x'). \quad (8.5) \end{aligned}$$

Фигурирующая здесь функциональная производная $-i \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)}$ имеет совершенно ясный физический смысл: она определяет (при $J \rightarrow 0$) средний (как в квантовомеханическом, так и в термодинамическом смысле) потенциал квантового поля $\tilde{\Phi}(x)$.

Действительно,

$$-i \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)} = \frac{1}{\langle S \rangle} \langle T \{ \Phi(x) S \} \rangle \xrightarrow{J \rightarrow 0} \langle \Phi(x) \rangle \equiv \tilde{\Phi}(x). \quad (8.6)$$

Соответственно положим формально

$$\tilde{\Phi}(x; J) = -i \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)}. \quad (8.7)$$

Тогда уравнение (8.5) принимает вид (аргументы $y, z, \dots$ употребляются на равных правах с x, x')

$$\begin{aligned} & \left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) + g\Gamma^{(0)} \tilde{\Phi}(x, J) \right\} G_c(x, x'; J) - \\ & - ig\Gamma^{(0)} \frac{\delta G_c(x, x'; J)}{\delta J(x)} = -\delta(x - x'). \quad (8.8) \end{aligned}$$

Совершенно так же преобразуется и уравнение (7.22). Рассматривая D_c и Q_c как функционалы от J [построенные по образцу (8.1) и (8.2)], мы получаем

$$\begin{aligned} Q_c(x, x'; J) &= -\frac{i}{\langle S \rangle} \frac{\delta \langle S \rangle G_c(x, x; J)}{\delta J(x')} = \\ &= -i \frac{\delta G_c(x, x; J)}{\delta J(x')} + G_c(x, x; J) \tilde{\Phi}(x'; J). \quad (8.9) \end{aligned}$$

Таким образом, уравнение (7.22) принимает вид

$$\begin{aligned} L(x) D_c(x, x'; J) + gf \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} G_c(x, x; J) \tilde{\Phi}(x'; J) + \\ + i \tilde{\Phi}(x', J) f J(x) - igf \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_c(x, x; J)}{\delta J(x')} = \\ = f \delta(x - x'). \quad (8.10) \end{aligned}$$

Соответственно вместо (7.24) мы получим, вводя функцию $\Delta_c(x, x'; J)$ по образцу (7.23):

$$L(x)\Delta_c(x, x'; J) + g \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} G_c(x, x; J) \tilde{\Phi}(x'; J) + \\ + i\tilde{\Phi}(x', J)J(x) - ig \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_c(x, x; J)}{\delta J(x')} = \delta(x - x'). \quad (8.10a)$$

В частности, для однофотонной функции Грина мы получаем

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} - \nabla_x^2 \right) D_{c, \alpha\beta}(x, x'; J) + \\ + eg_{\alpha\lambda} \operatorname{Sp} \gamma^\lambda G_c(x, x; J) \tilde{A}_\beta(x'; J) + ig_{\alpha\lambda} J^\lambda(x) \tilde{A}_\beta(x'; J) - \\ - ieg_{\alpha\lambda} \operatorname{Sp} \gamma^\lambda \frac{\delta G_c(x, x; J)}{\delta J^\beta(x')} = g_{\alpha\beta} \delta(x - x'). \quad (8.11)$$

В пространственно однородной системе при $J=0$ второй и третий члены в левой части (8.11) можно отбросить, так как в силу однородности средний потенциал не может зависеть от x , а постоянный потенциал, естественно, всегда можно считать равным нулю. Это относится и к общему уравнению (8.10).

Заметим, что «внешняя плотность тока» J в формуле (8.3) и других имеет чисто формальный смысл, и после вычисления вариационных производных ее следует приравнять нулю. В дальнейшем мы всегда будем иметь в виду эту операцию, не оговаривая ее особо. В системе заряженных частиц, однако, J^α входит в уравнение для среднего потенциала $\tilde{A}_\alpha(x; J)$ как настоящая классическая плотность 4-тока, порождающего данное поле. Действительно, пользуясь (8.3) и (8.7), мы получаем

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \tilde{A}_\alpha(x)}{\partial x_0^2} - \nabla_x^2 \tilde{A}_\alpha(x) = \\ = -g_{\alpha\lambda} J^\lambda(x) - ieg_{\alpha\lambda} \operatorname{Sp} \gamma^\lambda G_c(x, x) \quad (8.12)$$

(без суммирования по α). В частности, в нерелятивистском приближении (в том числе и в пренебрежении запаздыванием поля) для среднего скалярного потенциала $\tilde{\varphi} (= -\tilde{A}_0)$ находим, принимая во внимание связь $G_c(x, x)$ с концентрацией частиц $n(x)$, (5.4):

$$\nabla_x^2 \tilde{\varphi} = -\rho(x) - en(x). \quad (8.13)$$

Таким образом, уравнениями (8.12), (8.13) можно воспользоваться для вычисления среднего потенциала, создаваемого данной классической плотностью 4-тока. При этом, строго говоря, и однофермионную функцию Грина следует вычислять с учетом данного потенциала. Это означает, что в уравнении (8.8) надо считать $\tilde{\Phi}(x, J) \neq 0$ при $J=0$, а функцию J в (8.3) надо рассматривать как отклонение классической плотности 4-тока от истинного ее значения.

В заключение обратим внимание на одно важное соотношение между функцией D_c и средним потенциалом $\tilde{\Phi}$. Вспомним определение среднего потенциала (8.7) и проварьируем это равенство по $J(x')$. Принимая во внимание (7.11), легко находим

$$D_c(x, x') + \tilde{\Phi}(x) \tilde{\Phi}(x') = - \frac{\delta \tilde{\Phi}(x)}{\delta J(x')}. \quad (8.14)$$

В применении к электромагнитному полю именно это равенство делает ясным смысл условия (5.37): только в силу (5.37) формула (8.14) совместима с обычным условием Лоренца, накладываемым на компоненты 4-потенциала:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \tilde{A}_0(x)}{\partial x_0} - \frac{\partial \tilde{A}_i(x)}{\partial x_i} = 0. \quad (8.15)$$

В отсутствие второго слагаемого в левой части (например, в пространственно однородной системе) формула (8.14) очень ясно демонстрирует роль функции Грина как классической «функции влияния», определяющей изменение потенциала при появлении внешних источников. Естественно, имеется в виду однородность в отсутствие внешних классических источников (или — в электродинамике — в отсутствие источников поля сверх компенсирующего заряда). Иногда равенство (8.14) (без последнего члена) принимается за определение однобозонной функции Грина

$$D'_c(x, x'; J) = - \frac{\delta \tilde{\Phi}(x; J)}{\delta J(x')}. \quad (8.16)$$

Это определение эквивалентно (7.11) только при $\tilde{\Phi} = 0$ (почему мы и снабдили штрихом функцию D_c в левой части (8.16)); при $\tilde{\Phi} \neq 0$ функции D_c и D'_c различны см. (8.14)).

В приближении, линейном по $\tilde{\Phi}(x)$ (случай достаточно слабого поля), формула (8.16) позволяет сразу выразить $\tilde{\Phi}$ через J :

$$\tilde{\Phi}(x; J) = - \int dx' D'_c(x, x'; 0) J(x'). \quad (8.17)$$

Отсюда, в частности, следует, что $g \int D'_c(x, x') dx'_0$ при $x' = 0$ есть потенциал статического точечного «заряда»¹⁾, расположенного в точке $x' = 0$ [ср. замечание после формулы (5.40)]. Это обстоятельство наводит на мысль о возможности заменить любое прямое (бинарное) взаимодействие между частицами взаимодействием их с некоторым квантовым бозевским полем. Этот вопрос подробно рассмотрен в приложении I, п. е, где показано, что при определенных условиях такая замена действительно возможна.

Уравнение для функции D'_c , как легко убедиться, совпадает с (8.10), если вычеркнуть там второе и третье слагаемые в левой части, т. е. оно никогда не содержит явно потенциала $\Phi(x)$ и тока J . Легко проверить, например, что вариация уравнения (8.12) по $J^\beta(x')$ дает (8.11) без второго и третьего членов слева. По этой причине функцией D'_c иногда бывает удобнее пользоваться, чем D_c (так, например, обстоит дело при вычислении среднего потенциала в пространственно неоднородной системе заряженных частиц, см. § 21). С другой стороны, дисперсионные соотношения §§ 4, 5 явно выписаны именно для D_c , а не для D'_c . Чаще всего, однако, рассматривается однородная система, когда различие между D_c и D'_c исчезает. В дальнейшем мы всегда будем писать уравнения именно для D'_c , имея в виду, что она совпадает с D_c как раз тогда, когда последняя представляет интерес.

Цепочку уравнений для случая системы с прямым взаимодействием также легко записать в виде уравнения в функциональных производных. Действительно, по определению

$$G_c(x, x') = i \text{Spur } e^{\beta \mathcal{H}} T \{ a(x) \bar{a}(x') \}. \quad (8.18)$$

¹⁾ Здесь слово «заряд» написано в кавычках потому, что речь может идти не только об электродинамических взаимодействиях.

Введем функционал

$$G_c(x, x'; F) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x) \bar{a}(x') S \} \rangle, \quad (8.19)$$

где

$$S = T \left\{ \exp i \int d\lambda d\lambda' dx_0 F(\lambda, \lambda'; x_0) \bar{a}(\lambda, x_0) a(\lambda', x_0) \right\}. \quad (8.20)$$

Введем также, по аналогии с (8.7), величину

$$\Psi(\lambda, \lambda'; x_0) = -i \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta F(\lambda, \lambda'; x_0)}. \quad (8.21)$$

Выполняя варьирование, легко убедиться, что

$$G_{2,c}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, x_0; \lambda', x'_0) = -i \frac{\delta G_c(\lambda_3, x_0; \lambda', x'_0)}{\delta F(\lambda_1, \lambda_2; x_0)} + \\ + \Psi(\lambda_1, \lambda_2; x_0) G_c(\lambda_3, x_0; \lambda', x'_0). \quad (8.22)$$

Таким образом, уравнение (7.7) принимает вид

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu \right) G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) + \\ + \int d\lambda_1 F(\lambda, \lambda_1; x_0) G_c(\lambda_1, x_0; \lambda', x'_0) - \\ - \int d\lambda_1 (\lambda | T + V | \lambda_1) G_c(\lambda_1, x_0; \lambda', x'_0) - \\ - \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 (\lambda, \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2) \left\{ -i \frac{\delta G_c(\lambda_3, x_0; \lambda', x'_0)}{\delta F(\lambda_1, \lambda_2; x_0)} + \right. \\ \left. + \Psi(\lambda_1, \lambda_2; x_0) G_c(\lambda_3, x_0; \lambda', x'_0) \right\} = -\delta(x - x'). \quad (8.23)$$

Величина $\Psi(\lambda, \lambda'; x_0)$ имеет ясный физический смысл. Действительно, на основании (8.20) и (8.21)

$$\Psi(\lambda, \lambda'; x_0) =$$

$$= \frac{1}{\langle S \rangle} \langle T \{ \bar{a}(\lambda, x_0) a(\lambda', x_0) S \} \rangle \xrightarrow{F \rightarrow 0} \rho_I(\lambda, \lambda'; x_0), \quad (8.24)$$

где ρ_I — первый статистический оператор (1.9).

Заметим, что по определению (7.6) функция $G_{2,c}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3; x_0, \lambda', x'_0)$ антисимметрична (или симметрична, если речь идет о системе бозе-частиц) относительно перестановки

индексов λ_2, λ_3 . Это свойство не отражено явно в правой части (8.22), что могло бы привести к известным осложнениям при вычислении фигурирующих там величин каким-либо приближенным методом. В применении к уравнению (8.23) это не существенно, ибо $G_{2,c}$ входит туда лишь будучи умножена на функцию $(\lambda, \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2)$, а последняя, как уже указывалось, обладает должными свойствами симметрии. Осложнения, однако, могут возникнуть при переходе к координатному представлению, ибо в уравнении (7.7а) вместо полной матрицы фигурирует уже просто потенциальная энергия взаимодействия $U(x - x'')$. Поэтому в данном случае целесообразно явно симметризовать (или антисимметризовать) правую часть (8.22), полагая

$$G_{2,c}(x'', x'', x, x_0; x', x'_0) = \frac{1}{2} \left\{ -i \frac{\delta G_c(x, x')}{\delta F(x'', x''; x_0)} \pm \right. \\ \left. \pm i \frac{\delta G_c(x'', x_0; x', x'_0)}{\delta F(x'', x; x_0)} + G_c(x, x') \Psi(x'', x''; x_0) \mp \right. \\ \left. \mp G_c(x'', x_0; x', x'_0) \Psi(x'', x; x_0) \right\}. \quad (8.22a)$$

Здесь верхний или нижний знаки надо брать для статистик Ферми или Бозе соответственно. Тогда уравнение (7.7а) примет вид

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) \right\} G_c(x, x') + \int dx'' F(x, x''; x_0) \times \\ \times G_c(x'', x_0; x', x'_0) - \frac{1}{2} \int dx'' U(x - x'') \left\{ -i \frac{\delta G_c(x, x')}{\delta F(x'', x''; x_0)} \pm \right. \\ \left. \pm i \frac{\delta G_c(x'', x_0; x', x'_0)}{\delta F(x'', x; x_0)} + G_c(x, x') \Psi(x'', x''; x_0) \mp \right. \\ \left. \mp G_c(x'', x_0; x', x'_0) \Psi(x'', x; x_0) \right\} = -\delta(x - x'). \quad (8.23a)$$

При этом, естественно,

$$G_c(x, x') = \lim_{F \rightarrow 0} G_c(x, x'; F), \quad (8.24a)$$

$$\Psi(x'', x; x_0) \xrightarrow{F \rightarrow 0} \rho_1(x'', x; x_0). \quad (8.25)$$

§ 9. Массовый и поляризационный операторы. Эффективное волновое уравнение

В конкретных вычислениях удобно явно исключить функциональные производные от G по J , введя некоторые новые величины. Для этой цели произведем замену функционального аргумента, рассматривая G_c , R_c , ... как функционалы от $\tilde{\Phi}$, а не от J .

Обратимся прежде всего к уравнению (8.8). Мы имеем, очевидно,

$$\frac{\delta G_c(x, x')}{\delta J(z)} = \int dz' \frac{\delta G_c(x, x')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} \frac{\delta \tilde{\Phi}(z')}{\delta J(z)}. \quad (9.1)$$

Введем, далее, обратную функцию Грина $G_c^{-1}(x, x')$, определив ее очевидным соотношением

$$\int G_c(x, x'') G_c^{-1}(x'', x') dx'' = \delta(x - x'). \quad (9.2)$$

Варьируя (9.2) по $\tilde{\Phi}(z')$, получаем

$$\begin{aligned} \int \frac{\delta G_c(x, x'')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} G_c^{-1}(x'', x') dx'' = \\ = - \int G_c(x, x'') \frac{\delta G_c^{-1}(x'', x')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} dx'', \end{aligned}$$

откуда

$$\frac{\delta G_c(x, x')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} = - \int dy' dy'' G_c(x, y') \frac{\delta G_c^{-1}(y', y'')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} G_c(y'', x').$$

Соответственно, принимая во внимание (8.16), можем переписать последнее слагаемое в левой части (8.8) в виде

$$\begin{aligned} -ig^2 \Gamma^{(0)} \int dy' dy'' dz G_c(x, y') \times \\ \times \frac{\delta G_c^{-1}(y', y'')}{\delta g \tilde{\Phi}(z)} D'_c(z, x) G_c(y'', x'). \end{aligned} \quad (9.3)$$

Введем обозначения

$$\Gamma(x, y; z) = - \frac{\delta G_c^{-1}(x, y)}{\delta g \tilde{\Phi}(z)}, \quad (9.4)$$

$$M(x, y) = -ig^2 \Gamma^{(0)} \int dy' dz G_c(x, y') \Gamma(y', y; z) D'_c(z, x). \quad (9.5)$$

Тогда вместо (9.3) мы получим

$$- \int dy'' M(x, y'') G_c(y'', x), \quad (9.6)$$

а вместо уравнения (8.8)

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) + g \Gamma^{(0)} \tilde{\Phi}(x) \right\} G_c(x, x') - \\ - \int dy M(x, y) G_c(y, x') = -\delta(x - x'). \quad (9.7)$$

Отметим особо случай системы частиц с электромагнитным взаимодействием. Тогда в силу (6.18) равенства (9.4), (9.5) и (9.7) принимают вид

$$M(x, y) = -ie^2 \gamma^\alpha \int du dv D'_{c, \alpha\beta}(u, x) G_c(x, v) \Gamma^\beta(v, y; u), \quad (9.5a)$$

$$\Gamma^\alpha(x, y; z) = -\frac{\delta G_c(x, y)}{\delta e \tilde{A}_\alpha(z)}, \quad (9.4a)$$

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) + e \gamma^\alpha \tilde{A}_\alpha(x) \right\} G_c(x, x') - \\ - \int dy M(x, y) G_c(y, x') = -\delta(x - x'). \quad (9.7a)$$

Далее, рассмотрим специальный случай, когда взаимодействие с квантовым полем исчезает ($g \rightarrow 0$). Тогда уравнение (9.7) дает

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) \right\} G_c^{(0)}(x, x') = -\delta(x - x'). \quad (9.7б)$$

Легко проверить, что при $V(x) = 0$ (свободные частицы в отсутствие внешнего поля) этому уравнению действительно удовлетворяет функция (5.20). На основании (9.7б) равенство (9.7) удобно переписать в символическом виде, рассматривая x и x' как непрерывные матричные индексы:

$$[G_c^{(0)}]^{-1} G_c - g \Gamma^{(0)} \tilde{\Phi} G_c + M G_c = 1. \quad (9.7в)$$

Совершенно аналогично преобразуется и уравнение для однобозонной функции Грина. Рассмотрим уравнение типа (8.10) для $D'_c(x, x')$:

$$L(x) D'_c(x, x'; J) - i g f \text{Sp} \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_c(x, x; J)}{\delta J(x')} = f \delta(x - x'), \quad (9.8)$$

где L, f — операторы, введенные в § 7. Подобно (9.1) — (9.3),

$$\begin{aligned}
 igf \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_c(x, x'; J)}{\delta J(x')} = \\
 = ig^2 f \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} \int dy' dy'' dz G_c(x, y') \times \\
 \times \frac{\delta G_c^{-1}(y', y'')}{\delta g \tilde{\Phi}(z)} G_c(y'', x) D'_c(z, x'). \quad (9.9)
 \end{aligned}$$

Примем во внимание определение (9.4) и введем обозначение $\mathcal{P}(x, y) =$

$$= -ig^2 \operatorname{Sp} \Gamma^{(0)} \int dy' dy'' G_c(x, y') \Gamma(y', y''; y) G_c(y'', x). \quad (9.10)$$

Тогда правая часть (9.9) примет вид

$$\int dy \mathcal{P}(x, y) D'_c(y, x'), \quad (9.11)$$

и вместо (9.8) мы получим

$$L(x) D'_c(x, x') - f \int dy \mathcal{P}(x, y) D'_c(y, x') = f \delta(x - x'). \quad (9.12)$$

Аналогичное уравнение получится и для Δ'_c . В специальном случае, когда взаимодействие частиц с квантовым полем исчезает ($g \rightarrow 0$), мы получаем отсюда

$$L(x) \Delta_c^{(0)}(x, x') = \delta(x - x'). \quad (9.12a)$$

Это равенство, как и в случае однофермионной функции Грина, позволяет переписать (9.12) в символическом виде

$$[\Delta_c^{(0)}]^{-1} \Delta'_c - \mathcal{P} \Delta'_c = 1. \quad (9.12b)$$

Рассмотрим особо случай однофотонной функции Грина. В силу (9.10) и (6.18) мы получаем

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}_\alpha^\beta(x, y) = -ie^2 g_{\alpha\beta} \operatorname{Sp} \gamma^\delta \int du dv G_c(x, u) \Gamma^\beta(u, v; y) G_c(v, x). \\
 \quad (9.13)
 \end{aligned}$$

При этом уравнение (9.12) принимает вид

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} - \nabla_x^2 \right) D'_{c, \alpha\beta}(x, x') - \\
 - \int dy \mathcal{P}_\alpha^\gamma(x, y) D'_{c, \gamma\beta}(y, x') = g_{\alpha\beta} \delta(x - x'). \quad (9.14)
 \end{aligned}$$

Отметим, в частности, пространственно однородный случай, когда

$$\begin{aligned} D'_{c, \alpha\beta}(x, x') &= D_{c, \alpha\beta}(x, x') = \\ &= \int d\mathbf{k} d\omega D_{c, \alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega(x_0 - x'_0) + i(\mathbf{k}, x - x')}, \\ \mathcal{P}_\alpha^\gamma(x, y) &= \int d\mathbf{k} d\omega \mathcal{P}_\alpha^\gamma(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega(x_0 - x'_0) + i(\mathbf{k}, x - x')}. \end{aligned}$$

Подставляя эти разложения в (9.14), находим ($k_0 = \omega/c$)

$$(-k_0^2 + k^2) D_{c, \alpha\beta}(k) - g^{\gamma\mu} (2\pi)^4 \mathcal{P}_{\alpha\mu}(k) D_{c, \gamma\beta}(k) = \frac{g_{\alpha\beta}}{(2\pi)^4}. \quad (9.14a)$$

Заметим, что если для функции $D_{c, \alpha\beta}(k)$ воспользоваться калибровкой (5.35), то в таком же виде можно писать и $\mathcal{P}_{\alpha\beta}(k)$:

$$\mathcal{P}_{\alpha\beta}(k) = \left(g_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) \mathcal{P}(k). \quad (9.15)$$

Действительно, в силу (5.35) добавка типа $k_\alpha k_\beta \mathcal{P}_1$ не дает вклада в произведение $\mathcal{P}_\alpha^\gamma D_{c, \gamma\beta}$.

Естественно, такая форма записи (без дальнейших оговорок) пригодна лишь для вычисления калибровочно инвариантных величин. С другой стороны, желая вычислять выражения типа $\mathcal{P}_{\alpha\beta} \tilde{A}^\beta$, формулой (9.15) можно пользоваться, лишь если потенциалы удовлетворяют условию Лоренца.

Величины M и $\mathcal{P}$ называются соответственно массовым и поляризационным операторами. Эти названия заимствованы из квантовой теории поля и связаны с тем, что $M(x, y)$ описывает поправку к энергии (массе) частицы за счет взаимодействия с квантовым полем (в теории элементарных частиц — с вакуумом), а $\mathcal{P}(x, y)$ учитывает эффект поляризации вакуума. Мы увидим, что в электродинамических задачах тензор $\mathcal{P}(x, y)$ действительно описывает поляризацию среды в самом прямом смысле этого слова.

Функция $\Gamma(x, y; z)$ именуется полной вершинной частью. При исчезающе малом взаимодействии она сводится к $\Gamma^{(0)}$. Действительно, умножим уравнение (9.7) справа на $G_c^{-1}(x', x'')$

и проинтегрируем по x' , принимая во внимание (9.2). В пренебрежении величинами порядка g^2 мы получим

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) \right\} \delta(x - x'') + g \Gamma^{(0)} \tilde{\Phi}(x) \delta(x - x'') = \\ = -G_c^{-1}(x, x''),$$

откуда, используя (9.4),

$$\Gamma(x, y; z) = \Gamma^{(0)} \delta(x - y) \delta(x - z) + O(g^2). \quad (9.16)$$

Уравнения типа (9.7) и (9.12) были впервые получены Швингером [4] для случая квантовой электродинамики. Совместно с дополнительным условием Лоренца они эквивалентны обычной системе уравнений Максвелла и Дирака (или Шредингера). Аналогичные уравнения в функциональных производных можно получить и для функций Грина более высокого порядка (см. приложение V).

На основании результатов § 5 и уравнений (9.7) и (9.12) оказывается возможным поставить задачу о вычислении энергетического спектра системы как некоторую формально «одночастичную» задачу на собственные значения [15]. Именно, допустим, что потенциалы $V(x)$ и $\tilde{\Phi}(x)$ не зависят явно от x_0 , а функция $M(x, y)$ зависит лишь от разности временных координат

$$M(x, y) = M(x, y; x_0 - y_0).$$

Эти предположения суть не что иное, как необходимые условия возможности стационарной (или квазистационарной) постановки задачи. Только в этом случае, очевидно, и можно говорить об энергетическом спектре.

В соответствии с §§ 4, 5 введем фурье-образы, полагая

$$G_c(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE(x_0 - y_0)} G_c(x, y; E), \\ M(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE(x_0 - y_0)} M(x, y; E).$$

Тогда мы получим из (9.7)

$$\{E + \mu - T_x - V(x) + g \Gamma^{(0)} \tilde{\Phi}(x)\} G_c(x, x'; E) - \\ - 2\pi \int dy M(x, y; E) G_c(y, x'; E) = -\frac{1}{2\pi} \delta(x - x'). \quad (9.17)$$

Это уравнение удобно записать символически в виде

$$(E - R) G_c = -\frac{1}{2\pi}, \quad (9.17a)$$

где R — оператор, определяемый левой частью (9.17) (его можно назвать «эффективным гамильтонианом»). Отсюда явствует, что полюсы $G_c(x, x'; E)$ суть собственные значения оператора R . Таким образом, вычисление спектра в данном случае сводится к решению однородной задачи

$$\{E - R(E)\} \chi = 0, \quad (9.18)$$

где $\chi(x, E)$ — вспомогательная функция. Это есть «эффективное волновое уравнение», частным случаем которого является, например, известное уравнение Дирака с радиационными поправками ([1], [4]).

Совершенно аналогично формулируется и задача о собственных значениях для полюсов однобозонной функции Грина.

Действительно, положим

$$\Delta'_c(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE(x_0 - y_0)} \Delta'_c(x, y; E),$$

$$\mathcal{P}(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE(x_0 - y_0)} \mathcal{P}(x, y; E).$$

Тогда в полной аналогии с (9.17) получим

$$\{-E^2 + L(x)\} \Delta'_c(x, x'; E) -$$

$$- 2\pi \int dy \mathcal{P}(x, y; E) \Delta'_c(y, x'; E) = \frac{1}{2\pi} \delta(x - x'),$$

и, следовательно, полюсы $\Delta'_c(x, x'; E)$ определяются из задачи на собственные значения

$$\{-E^2 + L(x)\} \varphi(x, E) - 2\pi \int dy \mathcal{P}(x, y; E) \varphi(y, E) = 0. \quad (9.19)$$

Здесь $\varphi(x, E)$ — вспомогательная функция.

Важно заметить, что специальные свойства функций G_c и Δ'_c никак не использовались при выводе уравнений (9.18) и (9.19). Поэтому эффективные волновые уравнения такого типа справедливы (в указанных выше предположениях) для

любых двухвременных величин типа (3.17). Во всех этих случаях для определения соответствующей ветви спектра системы N взаимодействующих частиц получается уравнение в пространстве, вообще говоря, r измерений, где r — число независимых переменных, входящих в состав аргумента λ . От конкретной природы операторов C_1 и C_2 в (3.17) при этом зависит лишь явный вид операторов типа $R(E)$.

Уравнения типа (9.18), (9.19) дают, по-видимому, наиболее наглядное обоснование идеи о газе квазичастиц, спектр которых может зависеть от температуры.

Подчеркнем, однако, что фактически эта идея обосновывается в той мере, в какой она вообще справедлива, спектральными теоремами §§ 4, 5. Уравнения типа (9.18), (9.19) имеют лишь преимущество большей наглядности.

В связи со сказанным следует сделать несколько замечаний.

Во-первых, уравнение (9.18) (и ему подобные) получено без каких бы то ни было предположений о малости взаимодействия, разложимости в ряды и т. п., и интерпретация его основана исключительно на спектральных свойствах функций Грина, т. е. на точных соотношениях. Более того, после установления связи энергетического спектра системы со спектральными свойствами функций Грина (§ 5) возможность точно ввести такие формально «одночастичные», «двухчастичные» и т. д. уравнения становится почти тривиальной.

Во-вторых, задачи на собственные значения типа (9.18), как правило, не эрмитовские. Так, например, диагональные элементы массового, поляризационного и им подобных операторов могут иметь конечные мнимые части. В результате собственные значения E могут оказаться комплексными (имеет место затухание). Соответственно наряду с (9.18), (9.19) и т. д. следует рассматривать и сопряженные с ними уравнения.

В-третьих, уравнения типа (9.18) только выглядят как одночастичные; фактически же эффекты взаимодействия между частицами полностью в них учтены. Это проявляется в том, что названные уравнения, строго говоря, нельзя рассматривать независимо друг от друга. Например, в массовом операторе фигурирует однобозонная функция Грина, сама под-

лежащая определению. В конкретных задачах эту трудность (весьма существенную) иногда удается обойти полуфеноменологическим путем (см. ниже, § 24).

В-четвертых, эффективные волновые уравнения, как правило, нелинейны — массовый и поляризационный операторы сами зависят от G_c и D'_c .

Наконец, в-пятых, уравнения (9.18) и др. отличаются от обычных задач на собственные значения тем, что параметр E входит в них нелинейно: от E через $M(x, y; E)$ зависит и сам оператор R .

Именно последние два обстоятельства не позволяют обычным способом выразить $G_c(x, y; E)$, $\Delta'_c(x, y; E)$ и аналогичные им через решения (9.18), (9.19) и сопряженных с ними уравнений.

Из уравнений (9.18), (9.19) следует один вывод общего характера. Именно, мы видели в гл. I, что частоты E , определяющие особые точки функций Грина, не зависят от общего объема системы V ¹⁾. Следовательно, асимптотически не зависят от объема и операторы в левых частях эффективных волновых уравнений, т. е. и массовый и поляризационный операторы в пределе при $V \rightarrow \infty$ не зависят от V . Отсюда следует, что асимптотически при $V \rightarrow \infty$ объем системы вообще не входит в уравнения для функций Грина, т. е. последние представляют собой интенсивные, а не экстенсивные величины.

Если $G \sim \delta(\lambda - \lambda')$, как это имеет место, например, в p -представлении в однородной системе, то сказанное относится к коэффициентам при δ -функциях.

Рассмотрим теперь частный случай, когда фурье-образ массового (или поляризационного и т. д.) оператора $M(x, y; E)$ а) не зависит от E , т. е. $M(x, y)$ содержит множитель $\delta(x_0 - y_0)$, б) задан а priori, т. е. не содержит искомой функции Грина, и в) эрмитов. Разумеется, фактически такая ситуация — во всяком случае, для простейших функций Грина — может иметь место лишь приближенно. Например, так обстоит дело в системах с мгновенным (в частности,

¹⁾ Разумеется, речь идет лишь об асимптотических свойствах, справедливых при $V \rightarrow \infty$. До выполнения этого предельного перехода зависимость энергетического спектра системы от ее размеров вполне возможна и естественна.

кулоновским) взаимодействием, если считать последнее достаточно слабым и ограничиться первым не исчезающим приближением по константе связи (см. § 11).

В указанных условиях уравнение (9.18) превращается в стандартную линейную эрмитовскую задачу на собственные значения и функция Грина допускает обычное билинейное разложение по функциям $\chi(x, E)$. Последнее при этом имеет непосредственный физический смысл, который мы выясним, связав функции χ с функцией Грина. Действительно, обозначим через u совокупность параметров, нумерующих собственные функции χ , и положим

$$G_c(x, x'; E) = -\frac{1}{2\pi} \int du \chi(x, u) \bar{\chi}(x', u) \times \\ \times \left\{ \frac{a(u)}{E - E(u) - i\epsilon} + \frac{b(u)}{E - E(u) + i\epsilon} \right\} \quad (9.20)$$

(интеграл может, как всегда, обозначать также сумму, если уравнение (9.18) имеет и дискретный спектр). Принимая во внимание условие полноты

$$\int du \chi(x, u) \bar{\chi}(x', u) = \delta(x - x'),$$

видим, что правая часть (9.20) удовлетворяет уравнению (9.17), коль скоро

$$a(u) + b(u) = 1. \quad (9.21)$$

Отношение a/b определяется из граничных условий, накладываемых на функцию $G_c(x, x'; E)$. Как уже указывалось в §§ 6, 7, эти условия можно заменить дисперсионными соотношениями § 4. В данном случае (поскольку речь идет о причинной функции) следует воспользоваться равенством (4.10)

$$\operatorname{Re} G_c(x, x; E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{1 + e^{-\beta E'}}{1 - e^{-\beta E'}} \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} G_c(x, x; E')}{E' - E}.$$

Удобно перейти в (9.20) к другим переменным, выбирая в качестве одного из параметров u саму энергию $E(u) \equiv E'$; совокупность прочих параметров обозначим буквой v , и пусть $Z(E', v)$ есть якобиан перехода от u к (E', v) . Тогда мы

получим

$$G_c(x, x'; E) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \int dv Z(E', v) \chi(x, E', v) \times \\ \times \bar{\chi}(x', E', v) \left\{ \frac{a(E', v)}{E - E' - i\varepsilon} + \frac{b(E', v)}{E - E' + i\varepsilon} \right\}. \quad (9.22)$$

Заметим, что фактически интеграл по E' берется, вообще говоря, не в бесконечных пределах, а естественно обрывается на верхней и нижней границах спектра. Действительно, $\chi(x, E', v) \equiv 0$, если E' не есть собственное значение (9.18). По этой причине мы не будем впредь указывать пределы интегрирования в соответствующих формулах.

Допустим, что a и b вещественны и зависят только от энергии (это будет оправдано последующим расчетом: мы увидим, что таким путем действительно удается удовлетворить граничному условию). Тогда, полагая в (9.22) $x' = x$ и отделяя вещественную часть от мнимой, мы получаем

$$\text{Im } G_c(x, x; E) = -\frac{a-b}{2} \int |\chi(x, E, v)|^2 Z(E, v) dv, \quad (9.23)$$

$$\text{Re } G_c(x, x; E) = -\frac{1}{\pi} \int dE' \mathcal{P} \frac{\text{Im } G_c(x, x; E')}{E' - E} \cdot \frac{a+b}{a-b}. \quad (9.24)$$

Отсюда в связи с (4.10)

$$\frac{a+b}{a-b} = -\frac{1 + e^{-\beta E'}}{1 - e^{-\beta E'}}.$$

Совместно с (9.21) это дает

$$a(E') = \frac{1}{1 + e^{\beta E'}} \equiv n_F(E'), \\ b(E') = \frac{1}{1 + e^{-\beta E'}} \equiv 1 - n_F(E'). \quad (9.25)$$

Таким образом,

$$G_c(x, x'; E) = -\frac{1}{2\pi} \int dE' \int dv Z(E', v) \chi(x, E', v) \bar{\chi}(x', E', v) \times \\ \times \left\{ \frac{n_F(E')}{E - E' - i\varepsilon} + \frac{1 - n_F(E')}{E - E' + i\varepsilon} \right\}. \quad (9.26)$$

Совершенно аналогичные представления получаются и для функций $G_{r,a}^{(+)}$. Легко видеть, что выражение (9.26) формально совпадает с функцией Грина для системы независимых ферми-частиц, подчиняющихся волновому уравнению с гамильтонианом R (ср. (5.13) и (5.14)). Роль суммы по λ в данном случае играет интеграл по v с весом $Z(E', v)$. Это есть важный аргумент в пользу целесообразности нашего определения спектра, зависящего от температуры. Заметим теперь, что в силу (5.4) мы имеем (N — полное число частиц в системе)

$$\begin{aligned} i \int dx \operatorname{Sp} \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0}} G_c(x, x') = \\ = i \int dx \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} \operatorname{Sp} G_c(x, x; E) = N, \end{aligned}$$

т. е. на основании (9.26)

$$\int dE dv Z(E, v) n_F(E) \int dx |\chi(x, E, v)|^2 = N. \quad (9.27)$$

Если функция χ принадлежит непрерывному спектру, то интеграл по x от $|\chi|^2$ пропорционален V при $V \rightarrow \infty$. Удобно, однако, нормировать χ на единицу:

$$\operatorname{Sp} \int dx |\chi(x, E, v)|^2 = 1. \quad (9.28)$$

Для этого надо поделить интеграл по x на V , одновременно введя множитель V в Z . Соответственно в дальнейшем мы будем считать

$$Z(E, v) = V Z'(E, v), \quad (9.29)$$

где функция Z' асимптотически при $V \rightarrow \infty$ не зависит от V .

Сопоставляя (9.23) и (9.25) с (4.9), можно найти спектральную функцию J для произведения двух ферми-операторов $a, \bar{a}$ (напомним, что спинные переменные мы явно не пишем, считая J и G_c спинными матрицами). Мы получаем

$$J(x, E) = \frac{\int dv |\chi(x, E, v)|^2}{1 + e^{-\beta E}}, \quad (9.30)$$

и соответственно матричные элементы одночастичного статистического оператора (1.9), связанные с ферми-операторами, имеют вид

$$(\mathbf{x} | \rho_1 | \mathbf{x}')_F = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int dv \frac{Z(E, v)}{1 + e^{\beta E}} \chi(\mathbf{x}, E, v) \bar{\chi}(\mathbf{x}', E, v). \quad (9.31)$$

Формально (9.31), как и следовало ожидать в силу (9.26), совпадает с матричными элементами оператора ρ_1 для системы независимых ферми-частиц, волновые функции и энергии которых суть $\chi(\mathbf{x}, E, v)$ и E . В этом смысле $\chi(\mathbf{x}, E, v)$ можно назвать «эффективной волновой функцией»; подчеркнем, однако, что она может использоваться для вычисления средних значений только аддитивных динамических переменных.

Для системы бозе-частиц таким же образом получаем

$$G_c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = \frac{1}{2\pi} \int dE' dv Z(E', v) \chi(\mathbf{x}, E', v) \bar{\chi}(\mathbf{x}', E', v) \times \\ \times \left\{ \frac{n_B(E')}{E - E' - i\epsilon} - \frac{1 + n_B(E')}{E - E' + i\epsilon} \right\}, \quad (9.32)$$

где

$$n_B(E') = \frac{1}{e^{\beta E'} - 1}.$$

Соответственно матричные элементы оператора ρ_1 можно представить в виде

$$(\mathbf{x} | \rho_1 | \mathbf{x}')_B = \int dE dv \frac{Z(E, v)}{e^{\beta E} - 1} \chi(\mathbf{x}, E, v) \bar{\chi}(\mathbf{x}', E, v). \quad (9.33)$$

Следует, однако, иметь в виду, что выражения (9.31), (9.33) определяют, вообще говоря, лишь часть матричных элементов оператора (1.9). Действительно, в формуле (1.9) фигурируют операторы $a, \bar{a}$ всех возможных типов, в том числе и полевые (коль скоро речь идет о системе частиц, взаимодействующих с квантовым полем). Поэтому, кроме «корпускулярной» части (9.31), матрица ρ_1 должна содержать и «полевую» часть. Подобно (9.31), (9.33) в указанных выше условиях ее легко найти, составляя билинейное разложение типа (9.20) для соответствующей функции Грина. Заметим для этой цели, что фактически роль собственного значения

в (9.19) играет величина E^2 . Обозначим, как и раньше, через u параметры, нумерующие собственные функции $\varphi(x)$, и перейдем от них к переменными (E^2 , v). В полной аналогии с (9.22) получаем

$$\Delta_c(x, x'; E^2) = -\frac{1}{2\pi} \int dE'^2 dv Z(E'^2, v) \times \\ \times \varphi(x, E'^2, v) \bar{\varphi}(x', E'^2, v) \left\{ \frac{a}{E^2 - E'^2 - i\varepsilon} + \frac{b}{E^2 - E'^2 + i\varepsilon} \right\}, \quad (9.34)$$

причем функции a и b должны удовлетворять равенству (9.21). Сравнивая (9.34) с дисперсионным соотношением (5.32) (написанным для функции Δ_c), находим

$$\frac{a+b}{a-b} = -\frac{1 - e^{-\beta E}}{1 + e^{-\beta E}},$$

откуда (с учетом (9.21))

$$a = -n_B, \quad b = 1 + n_B. \quad (9.35)$$

Таким образом

$$\Delta_c(x, x'; E^2) = \frac{1}{2\pi} \int dE'^2 dv Z(E'^2, v) \varphi(x, E'^2, v) \times \\ \times \bar{\varphi}(x', E'^2, v) \left\{ \frac{n_B}{E^2 - E'^2 - i\varepsilon} - \frac{1 + n_B}{E^2 - E'^2 + i\varepsilon} \right\} \quad (9.36)$$

(легко убедиться, что выражение в фигурных скобках в (9.36) действительно зависит только от E'^2).

Для функции F_c (7.26) также можно написать эффективное волновое уравнение типа (9.19) и, дословно повторяя все предыдущие рассуждения, получить представление вида (9.34) (притом с тем же самым спектром). Именно, через спектральную функцию для F_c и выражается «полевая» часть одночастичного статистического оператора. Легко убедиться также, что формулы (9.26), (9.31), (9.32), (9.33) и (9.34) справедливы и при замене x на произвольные динамические переменные λ .

Массовый оператор естественным образом можно определить и для системы частиц с прямым взаимодействием (см. [5], [6]). Именно, положим по определению

$$\begin{aligned} \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 (\lambda, \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2) G_{2,c}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, x_0; \lambda', x'_0) = \\ = \int d\lambda_1 dx''_0 M(\lambda, x_0; \lambda_1, x''_0) G_c(\lambda_1, x''_0; \lambda', x'_0). \end{aligned} \quad (9.37)$$

В частности, в координатном представлении формула (9.37) принимает вид [см. (7.7a)]

$$\begin{aligned} \int dx'' U(x - x'') G_{2,c}(x'', x'', x, x_0; x', x'_0) = \\ = \int dx'' M(x, x'') G_c(x'', x'). \end{aligned} \quad (9.37a)$$

На основании (9.37) можем написать

$$\begin{aligned} M(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) = \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 d\lambda_4 dx''_0 (\lambda_1, \lambda_2 | U | \lambda_3, \lambda_2) \times \\ \times G_{2,c}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, x_0; \lambda_4, x''_0) G_c^{-1}(\lambda_4, x''_0; \lambda', x'_0). \end{aligned} \quad (9.38)$$

Иногда удобно записывать эту формулу в четырехмерном виде, полагая

$$\begin{aligned} (x, x_1 | U | x_3, x_2) = \\ = \delta(x_0 - x_{0,1}) \delta(x_0 - x_{0,2}) \delta(x_0 - x_{0,3}) (\lambda, \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2). \end{aligned} \quad (9.39)$$

Тогда

$$\begin{aligned} M(x, x') = \\ = \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 (x, x_1 | U | x_3, x_2) G_{2,c}(x_2, x_3; x_1, x_4) \times \\ \times G_c^{-1}(x_4, x'), \end{aligned} \quad (9.40)$$

где

$$G_{2,c}(x_2, x_3; x_1, x_4) = i \langle T \{ a(x_2) a(x_3) \bar{a}(x_1) \bar{a}(x_4) \} \rangle \quad (9.41)$$

есть двухчастичная функция Грина общего вида.

После введения массового оператора уравнение (7.7) формально превращается в интегродифференциальное уравнение для $G_c(x, x')$; фактически, однако, для вычисления $M(x, x')$ необходимо так или иначе «расцепить» цепочку (7.7)¹⁾.

¹⁾ Подробнее см. приложение VI.

Уравнение для фурье-образа $G_c(x, x'; E)$ при этом можно записать в виде, подобном (9.17):

$$\{E - R(x, E)\} G_c(x, x'; E) = -\frac{1}{2\pi} \delta(x - x'), \quad (9.42)$$

причем оператор R определяется равенством

$$R(x, E) G_c(x, x'; E) = \{T_x + V(x) - \mu\} G_c(x, x'; E) + \\ + 2\pi \int dx'' M(x, x''; E) G_c(x'', x'; E). \quad (9.43)$$

Очевидно, и в этом случае можно ввести эффективное волновое уравнение (9.18) со всеми вытекающими отсюда последствиями. В частности, в указанных выше условиях имеют место билинейное разложение (9.26) и формула (9.31).

Разложения типа (9.26), (9.34) можно написать и для двухвременных функций Грина более высоких порядков, коль скоро выполняются условия эрмитовости и линейности соответствующих эффективных волновых уравнений. При этом, однако, функции χ , φ будут, вообще говоря, зависеть от большего числа аргументов и будут удовлетворять условиям симметрии или антисимметрии относительно перестановок своих аргументов. В дальнейшем нам понадобится билинейное разложение для функции (5.24)

$$G_{2,c}(t) = i \langle T \{ \bar{a}(x_1, x_0) a(x_2, x_0) \bar{a}(x'_1, x'_0) a(x'_2, x'_0) \} \rangle.$$

Дисперсионное соотношение для нее есть (4.10) при $\eta = 1$, и следовательно, билинейное разложение имеет в точности бозевский вид [ср. (9.32)]

$$G_{2,c}(E) = \frac{1}{2\pi} \int dE' dv Z_2(E', v) \chi_2(x_1, x_2, E', v) \chi_2(x'_1, x'_2, E', v) \times \\ \times \left\{ \frac{n_B(E')}{E - E' - i\varepsilon} - \frac{1 + n_B(E')}{E - E' + i\varepsilon} \right\}. \quad (9.44)$$

Здесь индекс «2» у Z и χ напоминает, что речь идет о функциях, связанных с эффективным волновым уравнением для $G_{2,c}(x, x'; E)$.

§ 10. Уравнения Дайсона и группа мультипликативной перенормировки

Ввиду наличия операторов T_x и $L(x)$ уравнения (9.7) и (9.12) дифференциальные. Их можно обычным способом преобразовать в интегральные, введя в рассмотрение функции Грина свободных полей $G_c^{(0)}$ и $D_c^{(0)}$ [решения уравнений (9.76) и (9.12a)]. Для этого следует лишь формально рассматривать слагаемые, содержащие константу связи g , как неоднородность и воспользоваться обычным свойством функций Грина как функций влияния. Таким путем мы получаем из (9.7) и (9.12)

$$G_c(x, x') = G_c^{(0)}(x, x') + \\ + g \int dx'' G_c^{(0)}(x, x'') \Gamma^{(0)} \tilde{\Phi}(x'') G_c(x'', x') - \\ - \int dz dz' G_c^{(0)}(x, z) M(z, z') G_c(z', x'), \quad (10.1)$$

$$D'_c(x, x') = D_c^{(0)}(x, x') + \int du dv D_0^{(0)}(x, u) \mathcal{P}(u, v) D'_c(v, x') \quad (10.2)$$

или символически

$$G_c = G_c^{(0)} + g G_c^{(0)} \Gamma^{(0)} \tilde{\Phi} G_c - G_c^{(0)} M G_c, \quad (10.1a)$$

$$D'_c = D_c^{(0)} + D_c^{(0)} \mathcal{P} D'_c. \quad (10.2a)$$

Из уравнения (10.2a) особенно ясно виден смысл замены граничных условий (понимаемых буквально) дисперсионными соотношениями типа (4.7), (4.8) и (4.10). Действительно, формально мы получаем из (10.2a)

$$D'_c = \frac{1}{[D_c^{(0)}]^{-1} - \mathcal{P}}. \quad (10.26)$$

Фактически, однако, это выражение, взятое само по себе, не имеет смысла, если собственные значения знаменателя могут обращаться в нуль. Формула (10.26) становится определенной, если задать правило обхода полюсов. Последнее, однако, сводится к предписанию определенной связи между вещественной и мнимой частями D'_c , т. е. к дисперсионным соотношениям.

Аналогично можно переписать и уравнение для среднего потенциала (8.12). Мы получаем в символическом виде

$$\tilde{A}_\alpha = -D_{c,\alpha\beta}'^{(0)} (J^\beta + ie g^{\beta\mu} \text{Sp } \gamma_\mu G_c). \quad (10.3)$$

Эта формула есть частный случай общего соотношения, которое легко получить, составляя уравнение движения для потенциала $\tilde{\Phi}$:

$$\tilde{\Phi} = -D_c'^{(0)} (J + ig \Gamma^{(0)} G_c). \quad (10.3a)$$

К этим уравнениям следует присоединить еще определения массового и поляризационного операторов (9.5) и (9.10). В символической записи они имеют вид

$$M = -ig^2 \Gamma^{(0)} G_c \Gamma D_c', \quad (10.4)$$

$$\mathcal{P} = -ig^2 \text{Sp } \Gamma^{(0)} G_c \Gamma G_c. \quad (10.5)$$

Равенства (10.1) — (10.5) носят название уравнений Дайсона. Они чаще всего и используются для фактического определения причинных функций Грина.

Подчеркнем еще раз, что функции G_c и D_c' (и, следовательно, $G_c^{(0)}$ и $D_c'^{(0)}$) должны удовлетворять граничным условиям (3.21) или эквивалентным им дисперсионным соотношениям (4.10). (Естественно, речь идет здесь, как и в § 9, о граничных условиях по переменной $t = x_0 - x'_0$.) Условие (3.21) можно сформулировать как условие периодичности по «мнимой температуре» и соответственно разлагать искомые функции в ряды Фурье [26], [27]. Нам представляется более удобным пользоваться непосредственно дисперсионными соотношениями (аналогичная методика используется в квантовой теории поля [19]). Это позволяет, разлагать искомые функции в интегралы (а не ряды) Фурье по частотам. Так делалось, например, в § 9 при построении функций Грина из решений эффективного волнового уравнения. Иногда оказывается вообще достаточным определять из уравнений Дайсона только мнимую часть соответствующей функции Грина, восстанавливая затем вещественную часть непосредственно по дисперсионным соотношениям. Заметим в связи с этим, что, как мы видели в § 4, именно мнимые части функций Грина и нужно знать для вычисления спектральных функций и всех связанных с ними характеристик системы. Поэтому в некото-

рых приближенных расчетах оказывается возможным вообще обойтись без восстановления вещественных частей функций Грина.

Уравнения Дайсона обладают одним важным свойством, которое мы используем в дальнейшем для существенного улучшения приближенных расчетов в рамках теории возмущений. Именно, непосредственной проверкой легко убедиться, что рассматриваемые уравнения инвариантны относительно мультипликативного преобразования

$$G_c \rightarrow z_2 G_c, \quad D'_c \rightarrow z_3 D'_c, \quad \Gamma \rightarrow z_1^{-1} \Gamma, \quad \tilde{\Phi} \rightarrow z_3^{1/2} \tilde{\Phi}, \quad (10.6)$$

$$g^2 \rightarrow z_2^{-2} z_3^{-1} z_1^2 g^2, \quad (10.7)$$

где z_1, z_2, z_3 — непрерывно меняющиеся конечные параметры (см. [9]). При этом предполагается, что преобразованию подвергаются не только «полные» функции G_c, D'_c и Γ , но и «невозмущенные» $G_c^{(0)}, D'_c^{(0)}, \Gamma^{(0)}$.

Очевидно, преобразования (10.7) образуют группу (имеваемую группой перенормировки)¹⁾. Заметим, что она может заметно упроститься при наличии каких-либо дополнительных условий (благодаря которым параметры z_1, z_2, z_3 могут оказаться не независимыми). Так, в случае сил электромагнитного происхождения важное соотношение вытекает из условия градиентной инвариантности. Действительно, из квантовой механики известно (см., например, [13]), что при градиентном преобразовании потенциалов (5.33) волновая функция системы (в координатном представлении) умножается на

$$\frac{i}{e} \sum_a e_a f(x_a) \quad (10.8)$$

¹⁾ Группа перенормировки впервые была обнаружена в связи с задачами квантовой теории поля. Название связано с тем, что первоначально параметры z_1, z_2, z_3 играли роль перенормировочных констант (вообще говоря, бесконечных), вводимых на предмет явного устранения расходящихся выражений из матрицы рассеяния [10]. Лишь позднее [11], [12] выяснилось, что и после устранения бесконечностей уравнения Швингера допускают мультипликативную группу (10.6) — (10.7) с конечными параметрами z_1, z_2, z_3 . Наконец, в работе [9] было показано, что это обстоятельство вообще не связано с наличием расходимостей и не специфично для релятивистской квантовой теории поля, а представляет собой общее свойство уравнений Дайсона с весьма широким классом гамильтонианов взаимодействия.

(индекс a нумерует частицы системы, e_a — заряд a -й частицы). В силу (10.6) функция f преобразуется по закону $f \rightarrow z_3^{1/2} f$. С другой стороны, выражение (10.8) должно быть инвариантно относительно преобразований группы перенормировки (свойство градиентной инвариантности не должно зависеть от выбора параметров z_1, z_2, z_3). Следовательно, электрический заряд должен преобразовываться по закону

$$e^2 \rightarrow z_3^{-1} e^2, \quad (10.9)$$

т. е. для систем с электромагнитным (в частности, кулоновским) взаимодействием мы имеем тождественно

$$z_1 = z_2. \quad (10.10)$$

Это соотношение называется тождеством Уорда [14].

В силу (10.10) формулы (10.6), (10.7) для систем с электромагнитным взаимодействием принимают более простой вид:

$$\left. \begin{aligned} G_c &\rightarrow z G_c, & D'_c &\rightarrow z_3 D'_c, & \Gamma &\rightarrow z^{-1} \Gamma, \\ e^2 &\rightarrow z_3^{-1} e^2, & \tilde{A} &\rightarrow z_3^{1/2} \tilde{A}. \end{aligned} \right\} \quad (10.11)$$

Подчеркнем, что формулы (10.11) справедливы и для системы нейтральных частиц, если действующие между ними силы обусловлены наложением электрических полей.

§ 11. Улучшенная теория возмущений

Решение уравнений (10.1) — (10.2) составляет задачу исключительной сложности, и общих «рецептов» здесь в настоящее время дать нельзя. В этом параграфе мы изложим простейший приближенный способ вычисления функций Грина [16], [17], основанный на разложении массового и поляризационного операторов в ряды по степеням константы связи с последующим улучшением сходимости с помощью группы перенормировки. (Предполагается, что с помощью введения той или иной системы единиц константа связи g сделана безразмерной.) Подчеркнем сразу же, что этот прием — даже при достаточно малой константе связи — имеет лишь ограниченную область применимости, ибо исключает из рассмотрения зависимости, не аналитические по g при $g \rightarrow 0$ (важнейший пример задач последнего типа составляет теория

сверхпроводимости). Вместе с тем целый ряд задач (в частности, связанных с учетом кулоновского взаимодействия электронов в твердом теле) вполне можно рассматривать таким способом.

Ограничимся наиболее интересным для дальнейшего пространственно однородным случаем. Производя преобразование Фурье, мы получаем из (10.1), (10.2)

$$G_c(p) = \frac{G_c^{(0)}(p)}{1 + (2\pi)^8 G_c^{(0)}(p) M(p)}, \quad (11.1)$$

$$D_c(k) = \frac{D_c^{(0)}(k)}{1 - (2\pi)^8 D_c^{(0)}(k) \mathcal{P}(k)}. \quad (11.2)$$

В соответствии со сказанным в § 10 правила обхода полюсов в формулах (11.1), (11.2) определяются дисперсионными соотношениями (4.10).

Сравним равенство (11.2) (написанное для системы заряженных частиц с электромагнитным взаимодействием) с формулой (8.17). Из структуры этих соотношений сразу видно, что выражение $1 - (2\pi)^8 D_c^{(0)}(k) \mathcal{P}(k)$ имеет смысл обобщенной (зависящей от частоты и волнового вектора) диэлектрической проницаемости, чем и оправдывается название «поляризационный оператор».

Равенства (11.1) и (11.2) суть точные нелинейные интегральные уравнения относительно функций G_c и D_c . Мы будем решать их, вычисляя $M(p)$ и $\mathcal{P}(k)$ методом итераций. Этот метод мы будем называть теорией возмущений. Следует, однако, иметь в виду, что фактически это — более тонкая методика, чем стандартная теория возмущений, используемая, например, при вычислении S -матрицы (см. приложение I). Разложению по степеням константы связи подвергаются при этом отнюдь не сами функции Грина G_c и D_c , а знаменатели их, т. е. обратные функции G_c^{-1} и D_c^{-1} . Это обстоятельство весьма существенно. Из результатов § 5 явствует, что возможные изменения энергетического спектра системы, связанные с наличием взаимодействия, отражаются на структуре полюсов G_c и D_c . Следовательно, разлагая в ряд функции G_c^{-1} и D_c^{-1} , мы допускаем лишь известную ошибку в определении спектра; в то же время разложение самих функций Грина привело бы к полной «потере» влияния

взаимодействия на спектр системы: полюсы G_c и D_c при этом остались бы такими же, как и у $G_c^{(0)}$ и $D_c^{(0)}$.

То же самое можно выразить и несколько иным способом. Именно, разложение в ряды величин $M(p)$ и $\mathcal{P}(k)$ при определенных условиях может иметь смысл во всем пространстве импульсов; с другой стороны, из уравнений (11.1) и (11.2) ясно видно, что разложение самих функций $G_c(p)$ и $D_c(k)$ может оказаться совершенно бессмысленным в областях вблизи полюсов «свободных» функций $G_c^{(0)}(p)$ и $D_c^{(0)}(k)$.

На основании (9.5), (9.10) и (9.16) в первом исчезающем приближении по константе связи мы имеем ¹⁾

$$\begin{aligned} M(p) &\cong M^{(0)}(p) = \\ &= -ig^2 \int dp' \Gamma^{(0)} G_c^{(0)}(p') \Gamma^{(0)} D_c^{(0)}(p' - p), \end{aligned} \quad (11.3)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(k) &\cong \mathcal{P}^{(0)}(k) = \\ &= -ig^2 \text{Sp} \int dk' \Gamma^{(0)} G_c^{(0)}(k') \Gamma^{(0)} G_c^{(0)}(k' - k). \end{aligned} \quad (11.4)$$

Смысл аппроксимации (11.3) становится особенно ясным, если воспользоваться эффективным волновым уравнением (9.18) и ограничиться для простоты случаем $\Gamma^{(0)} = 1$ и $D_c^{(0)}(p) = D_c^{(0)}(p)$ [так обстоит дело в случае нерелятивистских систем с мгновенным взаимодействием, в частности в кулоновской задаче для твердого тела; ср. (5.39)]. Массовый оператор (11.3) в указанных условиях принимает вид

$$\begin{aligned} M^{(0)}(p) &= -ig^2 \int dp' D_c^{(0)}(p' - p) \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_0 G_c^{(0)}(p') = \\ &= -g^2 \int dp' D_c^{(0)}(p' - p) n_0(p') = M^{(0)}(p) \in \text{Re}. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Здесь $n_0(p')$ — среднее число заполнения состояния p' в отсутствие взаимодействия [использовано правило (5.5)]. Таким образом, последнее слагаемое в величине $R\chi$ (написанной в p -представлении) будет

$$-(2\pi)^4 g^2 \int dp' D_c^{(0)}(p' - p) n_0(p') \chi(p). \quad (10.5a)$$

¹⁾ Заметим, что в квантовой электродинамике аппроксимация (11.4) сразу дает результаты работы [18].

Заметим, что формально то же самое получилось бы, если бы в качестве G_c в (11.3) мы подставили не $G_c^{(0)}$, а выражение (9.26). При этом вместо $n_0(\mathbf{p})$ мы имели бы $2|\chi(\mathbf{p})|^2$ (двойка — из-за шпура по спинам), и уравнение (9.18) приобрело бы вид, типичный для метода самосогласованного поля; отличие от обычного уравнения Хартри состояло бы только: а) в отличной от нуля температуре и б) в экранированном характере потенциала $\tilde{\Phi}$. Таким образом, представление $G_c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$ в форме (9.26) с заменой D_c на $D_c^{(0)}$ в массовом операторе эквивалентно приближению Хартри (обобщенному на случай $T \neq 0$); аппроксимация же (11.3), в которой числа $n_0(\mathbf{p}')$ в (11.5а) считаются заданными, есть линейаризованный метод Хартри.

Подстановка (11.3) и (11.4) в (11.1) и (11.2) решает в данном приближении задачу об определении причинных функций Грина; далее, с помощью соотношения (4.9) можно найти и соответствующие спектральные функции.

Для вычисления следующего приближения надлежит подставить в массовый и поляризационный операторы только что найденные функции G_c и D_c и т. д. Заметим, что при этом получаются, вообще говоря, не последовательные разложения по степеням константы связи, а уже частично «свернутые» выражения, в которые константа связи может входить не только степенным, но и более сложным путем (см. ниже, пример в § 23 гл. V).

Следует подчеркнуть, что пределы применимости получаемых таким путем выражений, вообще говоря, не определяются с помощью формальной оценки безразмерной константы g . Во-первых, фактический параметр разложения может оказаться (и, как мы увидим в дальнейшем, действительно оказывается) различным в различных областях пространства импульсов¹⁾. Во-вторых, в статистической задаче (особенно при отличной от нуля температуре) чаще всего имеется несколько безразмерных параметров, и условия фактической малости поправок следующего приближения даются неравенствами, содержащими, как правило, все эти параметры. По-видимому, для оценки фактического параметра

¹⁾ Это обстоятельство хорошо известно в квантовой теории поля [1], [18].

разложения удобнее всего воспользоваться методикой группы перенормировки, которую мы и изложим здесь применительно к изотропному случаю. Основная идея состоит в том, чтобы производить разложения типа (11.3), (11.4) лишь в малой области пространства импульсов, а затем распространять результаты на все пространство с помощью групповых уравнений (10.6), (10.7). Мы увидим, что эти уравнения сведутся к дифференциальным, и, следовательно, надо задать граничные условия к ним. Для этой цели постараемся а priori определить поведение функции $D_c(k)$ в какой-либо области пространства импульсов. В дальнейшем мы ограничимся только системами с мгновенным взаимодействием и с силами электрического происхождения (это — либо система заряженных частиц, взаимодействующих по закону Кулона, либо система нейтральных атомов или молекул). На основании (5.39) и (8.17) в этом случае функция $D_c^{(0)}(k)$ зависит только от k ; возможная же зависимость D_c от k_0 есть «радиационная поправка». Таким образом, а priori можно узнать только вид функции $D_c(k, k_0)$ при $k_0 = 0$ (естественно, в некоторой области значений k). Для этой цели перепишем формулу (8.17), введя в нее фурье-образ $D'_c(x, x')$. Напомним, что в рассматриваемой сейчас пространственно однородной системе функции D'_c и D_c совпадают. (Естественно, как всегда в таких случаях, имеется в виду система, пространственно однородная в отсутствие внешнего поля.) Будем считать при этом, что $J(x')$ не зависит от x'_0 (статический «заряд»). Тогда мы получаем

$$\tilde{\Phi}(x) = (2\pi)^4 \int dk D_c(k, k_0) \Big|_{k_0=0} e^{ikx} J(k), \quad (11.6)$$

где

$$J(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dx e^{-ikx} J(x). \quad (11.7)$$

В частности, для точечного источника, локализованного в точке $x=0$, $J(x) = I_m \delta(x)$ (I_m — константа) и

$$\tilde{\Phi}(x) = 2\pi I_m \int dk D_c(k, k_0) \Big|_{k_0=0} e^{ikx}. \quad (11.8)$$

Отсюда явствует, что отличие $D_c(k, 0)$ от $D_c^{(0)}(k)$ означает не что иное, как «экранирование» внешнего поля частицами

системы (ср. замечание после формулы (11.2)). Очевидно, этот эффект не должен сказываться на достаточно малых расстояниях от источника поля. Но вид $\Phi(x)$ при малых $|x|$ определяется поведением функции $D_c(k, 0)$ при больших $|k|$. Следовательно, должен иметь место предельный переход

$$D_c(k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{k_0=0} D_c^{(0)}(k). \quad (11.9)$$

Это соотношение мы и будем использовать как граничное условие при решении уравнений группы перенормировки. Последние в данном случае имеют вид (10.11)

$$G_c \rightarrow z G_c, \quad \Gamma \rightarrow z^{-1} \Gamma, \quad D_c \rightarrow z_3 D_c, \quad g^2 \rightarrow z_3^{-1} g^2. \quad (11.10)$$

Таким образом, прежде всего надлежит исследовать поведение функции D_c , ибо именно с ней связан «заряд» g^2 .

Положим

$$D_c(k) = D_c^{(0)}(k) d(k), \quad (11.11)$$

где $D_c^{(0)}(k)$ — явно заданная известная функция, а $d(k)$ — новая неизвестная, для которой мы и будем писать уравнения группы. Поскольку функция $d(k)$ по определению безразмерна (размерности D_c и $D_c^{(0)}$ совпадают), она может зависеть только от отношений размерных переменных; далее, будучи скаляром, она должна явно выражаться только через скалярные комбинации своих аргументов. Выберем систему единиц, в которой масса безразмерна (и, как всегда, $\hbar = 1$). Обозначим через W_0 совокупность независимых характерных энергий, определяющих свойства системы (например, в металле это — энергия Ферми, в полупроводнике — χT и, может быть, параметр вида $n^{2/3}/2m_0$ и т. д.). В силу (11.10) функции D_c , G_c и Γ содержат произвольный (непрерывно меняющийся) параметр. Это позволяет ввести (пока неопределенную) «энергию нормировки» λ , полагая

$$d(k) = d\left(\frac{\omega}{\lambda}, \frac{k^2}{\lambda}, \frac{W_0}{\lambda}; g^2\right). \quad (11.12)$$

Заметим, что именно в этом пункте сказывается предположение об изотропии системы. В анизотропном случае (возможном в электронной теории твердого тела) вместо одного независимого скаляра k^2 мы имели бы два, а именно k^2

и $W(k)$ ($W(k)$ — энергия электрона как функция квазиимпульса). Вычисления в этом случае несколько усложняются (хотя и не изменяются по существу).

Поскольку граничное условие (11.9) накладывается при $\omega = 0$, рассмотрим сначала именно этот случай. Введем обозначение

$$d(k, \omega)|_{\omega=0} = d_0\left(\frac{k^2}{\lambda}, \frac{W_0}{\lambda}; g^2\right). \quad (11.13)$$

Равенства (11.10) показывают, что функцию d можно умножить на произвольную константу (с соответствующим изменением g^2). Следовательно, мы вправе наложить условие нормировки

$$d_0\left(1, \frac{W_0}{\lambda}; g^2\right) = 1. \quad (11.14)$$

Это означает, что при $k^2 = \lambda$ функция $D_c(k, 0)$ не отличается от $D_c^{(0)}(k)$ — «радиационные поправки» отсутствуют. Надлежит, однако, помнить, что в силу (10.7) преобразование d влечет за собой и преобразование константы связи g ; поэтому при произвольном λ в качестве g в (11.14) будет фигурировать, вообще говоря, отнюдь не настоящий «заряд». Истинное («реальное») значение g получается в (11.14) лишь, если согласовать это равенство с граничным условием (11.9). Это сводится к определенному выбору λ : истинному значению g соответствует $\lambda \rightarrow \infty$.

Составим теперь функциональное и дифференциальное уравнения для $d_0\left(\frac{k^2}{\lambda}, \frac{W_0}{\lambda}; g^2\right)$. Обозначим через λ_1 и λ_2 два различных значения энергии нормировки, а через g_1 и g_2 — соответствующие константы связи. На основании (11.10) и (11.14) мы получим

$$\begin{aligned} d_0\left(\frac{k^2}{\lambda_1}, \frac{W_0}{\lambda_1}; g_1^2\right) &= z_3 d_0\left(\frac{k^2}{\lambda_2}, \frac{W_0}{\lambda_2}; g_2^2\right), \\ g_2^2 &= z_3 g_1^2, \quad z_3 = d_0\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}, \frac{W_0}{\lambda_1}; g_1^2\right). \end{aligned}$$

Положим для краткости

$$\lambda_1 \equiv \lambda, \quad g_1 \equiv g, \quad \frac{k^2}{\lambda} = u, \quad \frac{W_0}{\lambda} = v, \quad \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = w. \quad (11.15)$$

Тогда

$$d_0(u, v; g^2) = d_0(w, v; g^2) d_0\left(\frac{u}{w}, \frac{v}{w}; g^2 d_0(w, v; g^2)\right). \quad (11.16)$$

Это есть функциональное уравнение группы перенормировки.

Следует, однако, иметь в виду, что это уравнение — даже с учетом (11.14) и (11.9) — еще недостаточно для однозначного определения $d_0(u, v; g^2)$: как можно показать [20], общее решение (11.16) содержит произвольные функции двух аргументов. Как и в теории поля [1], мы наложим дополнительное условие соответствия с теорией возмущений в предельном случае исчезающе малых значений константы связи. В связи с этим удобно превратить уравнение (11.16) в дифференциальное. Именно, дифференцируя (11.16) по u и полагая затем $w = u$, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u} g^2 d_0(u, v; g^2) = \\ = \frac{g^2 d_0(u, v; g^2)}{u} \left[\frac{d}{d\xi} d_0\left(\xi, \frac{v}{u}; g^2 d_0(u, v; g^2)\right) \right]_{\xi=1}. \end{aligned} \quad (11.17)$$

Равенство (11.17) есть не что иное, как одно из уравнений Ли, описывающих непрерывную группу (11.10). Граничное условие к уравнению (11.17) вытекает из (11.14) и (11.9). В силу конечности величины W_0 оно гласит

$$d_0(u, v; g^2) \xrightarrow[u \rightarrow 1]{v \rightarrow 0} 1. \quad (11.18)$$

Производную по ξ , фигурирующую в правой части (11.17), определим с помощью развитой выше теории возмущений (чем и гарантируется соответствие с последней при $g \rightarrow 0$). В связи с этим следует обратить внимание на два важных обстоятельства. Во-первых, теория возмущений используется здесь для нахождения функции d_0 не во всем пространстве импульсов, а лишь в бесконечно малой окрестности «точки нормировки» $\xi = 1$. Это позволяет, в частности, не опасаться указанной выше трудности с полюсами. Во-вторых, и это еще более существенно, параметром разложения является здесь не сама константа связи g^2 , а величина

$$g_{\text{inv}}^2 = g^2 d_0(u, v; g^2). \quad (11.19)$$

Мы будем называть выражение (11.19) «инвариантным зарядом», ибо оно инвариантно относительно преобразований группы перенормировки (11.10). Очевидно, инвариантный заряд различен в различных областях пространства импульсов, и именно так и определяется истинный параметр разложения.

Заметим, что величина g_{inv}^2 (11.19) имеет совершенно ясный физический смысл: из сопоставления с (11.8) явствует, что это есть «экранированная» константа связи, ослабленная за счет коллективного взаимодействия частиц среды. Можно сказать, таким образом, что основной смысл группы перенормировки состоит в разложении искомых величин не по «истинному», а по экранированному заряду (из физических соображений очевидно, что последний всегда меньше первого; это будет подтверждено и прямым расчетом).

В первом исчезающем приближении теорий возмущений функция d_0 дается формулой (11.2) с поляризационным оператором (11.4) (при $\omega=0$). Поскольку произведение $\mathcal{P}^{(0)}(k) D_c^{(0)}(k)$ безразмерно, оно может зависеть лишь от отношения аргументов

$$(2\pi)^8 \mathcal{P}^{(0)}(k) D_c^{(0)}(k) \big|_{\omega=0} = g^2 f\left(\frac{k^2}{W_0}\right) \equiv g^2 f\left(\frac{u}{v}\right) \quad (11.20)$$

(явный вид функции f , конечно, различен в различных конкретных случаях). Таким образом, с точностью до членов высшего порядка и с учетом условия нормировки (11.14) мы получаем

$$d_0\left(\xi, \frac{v}{u}; g^2 d_0(u, v; g^2)\right) \cong 1 + g^2 d_0(u, v; g^2) \left\{ f\left(\frac{\xi u}{v}\right) - f\left(\frac{u}{v}\right) \right\}. \quad (11.21)$$

Подставляя это в уравнение (11.17) и пользуясь граничным условием (11.18), легко находим

$$d_0(u, v; g^2) = \frac{1}{1 - g^2 f\left(\frac{u}{v}\right)}. \quad (11.22)$$

Условие применимости этого выражения имеет вид

$$\frac{g^2}{1 - g^2 f\left(\frac{u}{v}\right)} \ll 1. \quad (11.23)$$

Ниже мы увидим, что в ряде случаев $f(u/v) < 0$, и неравенство (11.23) может оказаться значительно слабее требования $g^2 \ll 1$.

Перейдем теперь к определению функции $d(k)$ при $\omega \neq 0$. Положим

$$d(k) = S^{-1}(t, u, v; g^2), \quad (11.24)$$

где

$$t = \frac{\omega + k^2}{\lambda}, \quad (11.25)$$

а величины u, v даются формулами (11.15). Очевидно,

$$S(u, u, v; g^2) = d_0^{-1}(u, v; g^2) \quad (=1 \text{ при } u=1). \quad (11.26)$$

Дифференциальное уравнение для функции S легко получается изложенным выше способом

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t, u, v; g^2)}{\partial t} = \\ = \frac{d_0^{-1}(t, v; g^2)}{t} \left[\frac{d}{d\xi} S\left(\xi, \frac{u}{t}, \frac{v}{t}; g^2 d_0(t, v; g^2)\right) \right]_{\xi=1}. \end{aligned} \quad (11.27)$$

Граничное условие к (11.27) дается формулой (11.26). По соображениям размерности мы имеем

$$(2\pi)^8 \mathcal{P}^{(0)}(k) D_c^{(0)}(k) = g^2 \varphi\left(\frac{t}{v}, \frac{u}{v}\right). \quad (11.28)$$

Очевидно, $\varphi\left(\frac{u}{v}, \frac{u}{v}\right) = f(u/v)$. Для вычисления производной в (11.27) опять воспользуемся, как и раньше, теорией возмущений, предполагая справедливым условие

$$g^2 d_0(t, v; g^2) \ll 1. \quad (11.29)$$

Тогда уравнение (11.27) с учетом (11.26) дает

$$S(t, u, v; g^2) \cong 1 - g^2 \varphi\left(\frac{t}{v}, \frac{u}{v}\right). \quad (11.30)$$

Таким образом, в условиях (11.23) и (11.29) для функции $D_c(k)$ (как при $\omega = 0$, так и при $\omega \neq 0$) оказываются справедливыми выражения, полученные по теории возмущений; условия применимости их, однако, не сводятся к примитивному требованию $g^2 \ll 1$. Особенно существенно, что из неравенства (11.29), вообще говоря, не вытекает малость

$g^2 \varphi\left(\frac{t}{v}, \frac{u}{v}\right)$. Последняя величина вполне может быть в этих условиях сравнима с единицей, и именно это обстоятельство в принципе позволяет исследовать развитым здесь методом появление новых полюсов у функций Грина.

Вполне аналогичным методом можно воспользоваться и для вычисления $G_c(p)$. Положим

$$G_c(p) = G_c^{(0)}(p) Q^{-1}(p).$$

На основании (11.10) функциональное уравнение для Q имеет вид (в обозначениях (11.15), (11.25))

$$Q(t, u, v; g^2) = \frac{Q(w, w, v; g^2) Q\left(\frac{t}{w}, \frac{u}{w}, \frac{v}{w}; g^2 d_0(w, v; g^2)\right)}{Q\left(1, 1, \frac{v}{w}; g^2 d_0(w, v; g^2)\right)}. \quad (11.31)$$

Функция Q зависит от двух переменных t, u , и в этом смысле она аналогична вершинной части в квантовой электродинамике. Методы решения, развитые в связи с последней задачей [28], можно было бы без труда применить и к уравнению (11.31); для дальнейшего, однако, это нам не понадобится.

Для систем с прямым взаимодействием также можно развить теорию возмущений, аналогичную рассмотренной выше ¹⁾. Первое приближение ее состоит в замене двухчастичной функции Грина в (7.7) ее значением при $H_{\text{int}} = 0$:

$$\begin{aligned} G_{2,c}(\lambda', \lambda'', \lambda''', x_0; \lambda_1, x'_0) = \\ = iG_c(\lambda'', x_0; \lambda', x_0) G_c(\lambda''', x_0; \lambda_1, x'_0) - \\ - iG_c(\lambda''', x_0; \lambda', x_0) G_c(\lambda'', x_0; \lambda_1, x'_0). \end{aligned} \quad (11.32)$$

Функции Грина при совпадающих аргументах определяются по правилу (5.5).

¹⁾ Легко также развить теорию возмущений и в функциональном виде, введя массовый оператор и вершинную часть в полной аналогии с § 9. При этом, однако, все равно возникает необходимость расцеплять уравнение для двухчастичной функции Грина (см. приложение VI).

При этом массовый оператор для системы с бинарным взаимодействием будет в силу (9.40)

$$M(x, x') = 2i \int dx_1 dx_2 (x, x_1 | U | x', x_2) G_c(x_2, x_1). \quad (11.33)$$

Эта формула справедлива как для фермиевской, так и для бозевской системы. Напомним, что матрица $(x, x_1 | U | x', x_2)$ либо антисимметрична, либо симметрична относительно перестановок $x \rightleftharpoons x_1$ и $x' \rightleftharpoons x_2$, а аргументы $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ включают также и спинные переменные.

Аппроксимация (11.33), однако, непригодна для систем, содержащих потенциалы типа, например, твердых шаров. Она мало удовлетворительна также для систем с регулярными, но сильными взаимодействиями.

В случае когда силы взаимодействия отличны от нуля лишь на достаточно малых расстояниях (порядка некоей характерной длины a), оказывается возможным развить специальную форму теории возмущений (см. [21], [22]), в которой роль малого параметра играет не «константа связи» или инвариантный заряд (11.19), а произведение $an^{1/3}$ (n — концентрация частиц, a — малая, но конечная величина). Именно, мы постараемся выразить массовый оператор не через потенциал взаимодействия, а через амплитуду рассеяния частиц (сохраняющую смысл и для сингулярных потенциалов). При этом, в силу предположения о малости параметра $an^{1/3}$, достаточно будет рассмотреть лишь случай рассеяния частиц в пустоте. Иначе говоря, на определенном этапе расчета мы пренебрежем «экранирующим» действием всего коллектива частиц, принимая во внимание только парные столкновения между ними.

Имея в виду переход к амплитуде рассеяния, введем новый оператор Q , полагая

$$M(x, x') = \int dx_1 dx_2 (x, x_1 | Q | x', x_2) G_c(x_2, x_1). \quad (11.34)$$

(Предполагается, что матричные элементы $(x, x_1 | Q | x', x_2)$ обладают должными свойствами симметрии — соответственно статистике частиц, составляющих систему.)

Уравнение для Q мы получим, сопоставляя (11.34) с определением массового оператора (9.37). Ограничимся пространственно однородными системами. Тогда удобно

воспользоваться импульсным представлением, полагая $\lambda = \{p, s\}$ (s — спиновая координата). При этом, очевидно,

$$G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) = \delta(p - p') G_c(p; s, s')$$

и

$$\begin{aligned} & (\lambda, x_0, \lambda_1, x_{1,0} | U | \lambda', x'_0, \lambda_2, x_{2,0}) = \\ & = \delta(p_1 + p - p' - p_2) U'(p, s, p_1, s_1; p', s', p_2, s_2). \end{aligned} \quad (11.35)$$

Аналогичным путем вводятся и величины Q' , $G'_{2,c}$. Сравнивая (11.34) и (9.37), легко находим

$$\begin{aligned} & \int dp' Q'(p, s, p', s_1; p, s', p', s_2) G_c(p'; s_1, s_2) = \\ & = G_c^{-1}(p; s_4, s') \int dp' dp'' dp''' \delta(p + p' - p'' - p''') \times \\ & \times U'(p, s, p', s_1; p'', s_2, p''', s_3) G'_{2c}(p'', s_3, p''', s_2; p', s_1, p, s_4) \end{aligned} \quad (11.36)$$

(по повторяющимся спиновым индексам подразумевается суммирование).

Ограничимся в дальнейшем случае сил, не зависящих от спинов. Тогда

$$\begin{aligned} & G_c(p; s, s') = \delta_{ss'} G_c(p); \\ & Q'(p, s, p', s_1; p'', s_2, p''', s_3) = \\ & = \delta_{ss_1} \delta_{s_1 s_3} Q'(p, p'; p''', p'') \pm \delta_{ss_3} \delta_{s_1 s_2} Q'(p, p'; p'', p'''). \end{aligned} \quad (11.37)$$

Верхний знак (+) берется для бозе-частиц, нижний знак (—) — для ферми-частиц. На функции Q' в правой части (11.37) уже не следует накладывать условие антисимметрии (или симметрии). В такой же форме можно представить и функции $G'_{2,c}$ и U' (достаточно, очевидно, считать антисимметризованной лишь одну из них, например U , так как в (11.36) входит только их произведение). Соответственно для массового оператора мы получаем (S — спин отдельной частицы)

$$\begin{aligned} & M_1(p_1; s, s') = \\ & = -(2\pi)^8 \delta_{ss'} \left\{ (2S+1) \int dp G_c(p) Q'(p_1, p; p_1, p) \pm \right. \\ & \quad \left. \pm \int dp G_c(p) Q'(p_1, p; p, p_1) \right\}, \end{aligned} \quad (11.38)$$

а уравнение (11.36) принимает вид

$$\begin{aligned} \int dp G_c(p) Q'(p_1, p; p_1, p) = \\ = \int dp_2 dp_3 dp_4 \delta(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) \times \\ \times U'(p_1, p_2; p_3, p_4) G_c^{-1}(p_1) G'_{2,c}(p_4, p_3; p_2, p_1), \end{aligned} \quad (11.39)$$

$$\begin{aligned} U'(p_1, p_2; p_3, p_4) = \\ = \frac{1}{(2\pi)^{12}} \int dx U(x) e^{-ikx} \Big|_{k=(p_1-p_1-p_3+p_4)/2} \end{aligned} \quad (11.40)$$

[Очевидно, достаточно написать это уравнение лишь для одного из слагаемых в (11.37)]. Положим, далее,

$$Q'(p_1, p_2; p_3, p_4) = \int dq U(q) S(p_1 - q, p_2 + q; p_3, p_4). \quad (11.41)$$

Подставляя это в (11.39), видим, что в качестве S можно взять выражение

$$S(p_1, p_2; p_3, p_4) = \frac{1}{(2\pi)^8} G_c^{-1}(p_3) G_c^{-1}(p_4) G'_{2c}(p_1, p_2; p_4, p_3). \quad (11.42)$$

При этом должно выполняться равенство

$$p_1 + p_2 - p_3 - p_4 = 0. \quad (11.43)$$

На основании (11.42) уравнение для S немедленно получается из уравнения для двухчастичной функции Грина $G_{2,c}$. Последнее выведено в приложении V. Имея в виду предполагаемую малость параметра $an^{1/3}$, можно ограничиться приближенной формой (V. 11), (V. 12). Переходя в (V. 11) к фурье-образам и принимая во внимание равенства (11.35) и (11.37) (написанные для $G_{2,c}$), мы получаем

$$\begin{aligned} G_c^{-1}(p_1) G_c^{-1}(p_2) G'_{2,c}(p_1, p_2; p_3, p_4) - \\ - (2\pi)^8 i \int dp U(p) G'_{2,c}(p_1 - p, p_2 + p; p_3, p_4) = -i\delta(p_1 - p_4), \end{aligned} \quad (11.44)$$

причем импульсы p_1, p_2, p_3, p_4 связаны условием (11.43). Комбинируя (11.44) и (11.42), находим с учетом (11.43)

$$S(p_1, p_2; p_3, p_4) - i(2\pi)^8 \int dq U(q) G_c(p_1) G_c(p_2) \times \\ \times S(p_1 - q, p_2 + q; p_3, p_4) = -i\delta(p_1 - p_3). \quad (11.45)$$

Удобно ввести новые переменные, полагая

$$p_1 + p_2 = p_3 + p_4 = p, \\ p_1 - p_2 = 2k'; \quad p_3 - p_4 = 2k''. \quad (11.46)$$

Очевидно, p есть 4-импульс центра инерции системы двух частиц (сохраняющийся при столкновении), а k' и k'' — относительные импульсы до и после столкновения. В этих переменных уравнение (11.45) принимает вид

$$S(k', k''; p) - i(2\pi)^8 G_c\left(\frac{p}{2} + k'\right) G_c\left(\frac{p}{2} - k'\right) \times \\ \times \int dq U(q) S(k' - q, k''; p) = -i\delta(k' - k''). \quad (11.47)$$

Перейдем также к переменным (11.46) в правой части (11.41). Получим

$$Q'(k', k''; p) = \int dq U(q) S(k' - q, k''; p). \quad (11.48)$$

Поскольку взаимодействие не запаздывающее (т. е. $U(x)$ содержит $\delta(x_0)$), $U(q) = U(q)$, т. е. не зависит от q_0 . Отсюда явствует, что достаточно вычислить не саму функцию S , а интеграл от нее по четвертой компоненте относительного импульса

$$F(k', k''; p) = \int dk'_0 S(k', k''; p). \quad (11.49)$$

Интегрируя (11.47) по k'_0 , получаем

$$F(k', k''; p) - J \int dq U(q) F(k' - q, k''; p) = -i\delta(k' - k''), \quad (11.50)$$

где

$$J = i(2\pi)^8 \int dk'_0 G_c\left(\frac{p}{2} + k'\right) G_c\left(\frac{p}{2} - k'\right).$$

В принятой аппроксимации в качестве G_c сюда следует подставить функцию Грина $G_{c, \text{vac}}$ для одной частицы в вакууме.

Эта функция, как легко убедиться, дается выражением

$$G_{c, \text{vac}}(p) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{1}{p_0 - p^2/2m + i\varepsilon}, \quad (11.51)$$

и следовательно,

$$J = \frac{2\pi}{p_0 - \frac{p^2}{4m} - \frac{k'^2}{m} + i\eta}.$$

Таким образом, уравнение (11.50) принимает вид

$$\begin{aligned} F(k', k''; p) - \frac{2\pi}{E - \frac{k'^2}{m} + i\eta} \int dq U(q) F(k' - q, k''; p) = \\ = -i\delta(k' - k''), \end{aligned} \quad (11.52)$$

где $E = p_0 - \frac{p^2}{4m}$.

Соответствующее однородное уравнение есть формально не что иное, как уравнение для относительного движения двух частиц, написанное в p -представлении. Следует помнить, что m обозначает у нас массу одной частицы, и следовательно, приведенная масса есть $m/2$. Решения однородного уравнения (точнее, некоторые интегралы от них — см. ниже) мы будем считать известными и обозначать через $\chi_k(k')$ (k — относительный импульс на бесконечности). Принимая во внимание равенство

$$\int dk \bar{\chi}_k(k') \chi_k(k'') = \delta(k' - k''),$$

легко находим

$$F(k', k''; p) = -i \int dk \frac{E - \frac{k''^2}{m} + i\eta}{E - \frac{k^2}{m} + i\eta} \chi_k(k') \bar{\chi}_k(k''). \quad (11.53)$$

На основании (11.48) и (11.49) получаем теперь

$$\begin{aligned} Q'(k', k''; p) = \\ = -i \int dq dk U(q) \frac{E - \frac{k''^2}{m} + i\eta}{E - \frac{k^2}{m} + i\eta} \chi_k(k' - q) \bar{\chi}_k(k''). \end{aligned} \quad (11.54)$$

Введем амплитуду рассеяния частиц $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ соотношением

$$\chi_k(\mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{4\pi f(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{k^2 - k'^2 + i\eta}. \quad (11.55)$$

Очевидно,

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = m \int U(\mathbf{q}) \chi_k(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) d\mathbf{q}, \quad (11.56)$$

и следовательно, равенство (11.54) принимает вид

$$\begin{aligned} Q'(\mathbf{k}', \mathbf{k}''; p) &= -i/m \int d\mathbf{k} \frac{E - \frac{k''^2}{m} + i\eta}{E - \frac{k^2}{m} + i\eta} \chi_k(\mathbf{k}'') f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \\ &= -\frac{i}{m} \left\{ f(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') + 4\pi \int d\mathbf{k} \frac{E - \frac{k''^2}{m} + i\eta}{E - \frac{k^2}{m} + i\eta} \cdot \frac{\bar{f}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{k^2 - k''^2 - i\eta} \right\}. \end{aligned} \quad (11.57)$$

Таким образом, искомая функция Q' выражается только через амплитуду рассеяния, а потенциал взаимодействия нигде более в явном виде не фигурирует. Это позволяет развить специальную форму теории возмущений, в которой искомые величины разлагаются в ряды по степеням параметра $an^{1/2}$, а не энергии взаимодействия. В частности, в первом приближении вторым слагаемым в фигурной скобке в (11.57) следует пренебречь. Иначе говоря, здесь можно пользоваться формально обычной теорией возмущений, заменяя лишь матрицу $U'(p_1, p_2; p_1, p_2)$ на

$$\frac{1}{2m} f\left(\frac{p_1 - p_2}{2}, \frac{p_1 - p_2}{2}\right).$$

Для массового оператора мы получаем при этом

$$\begin{aligned} M(p_1; s, s') &= \\ &= i(2\pi)^8 \delta_{ss'} \frac{1}{m} \left\{ (2S + 1) \int dp G_c(p) f\left(\frac{p_1 - p}{2}, \frac{p_1 - p}{2}\right) \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \int dp G_c(p) f\left(\frac{p_1 - p}{2}, \frac{p - p_1}{2}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (11.58)$$

Как мы знаем (§ 5), интеграл по p_0 от $G_c(p, p_0)$ дает (нормированную на числа заполнения) функцию распределения частиц по импульсам $n(p)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 G_c(p, p_0) = \pm \frac{i}{(2\pi)^3} n(p) \quad (11.59)$$

(верхний и нижний знаки — соответственно для частиц Бозе и Ферми). Соответственно массовый оператор первого приближения принимает вид

$$\begin{aligned} M(p_1; s, s') = & \\ = \frac{(2\pi)^5}{m} \delta_{ss'} \left\{ \mp (2S+1) \int dp n(p) f\left(\frac{p_1-p}{2}, \frac{p_1-p}{2}\right) - \right. & \\ \left. - \int dp n(p) f\left(\frac{p_1-p}{2}, \frac{p-p_1}{2}\right) \right\}. \quad (11.60) \end{aligned}$$

В следующем приближении надо уже учитывать отличие функции Грина от «вакуумного» значения (11.51); соответственно массовый оператор будет, вообще говоря, зависеть от температуры.

ГЛАВА III

ФУНКЦИИ ГРИНА И МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИСТЕМЫ

§ 12. Функции Грина и термодинамический потенциал

Связь функций Грина со статистическим оператором вытекает из спектральных теорем §§ 4, 5. Как мы видели, зная s -частичную функцию Грина, можно определить соответствующую спектральную функцию; последняя как раз и есть фурье-образ матричного элемента s -частичного статистического оператора.

В настоящем параграфе мы дадим формулы, связывающие термодинамический потенциал системы Ω непосредственно с простейшими функциями Грина — одно- и двухфермионной и однобозонной (а также с вершинной частью). Явные выкладки будут проделаны для системы ферми-частиц. Перенос результатов на случай бозе-системы требует лишь изменения некоторых знаков (что будет в должном месте указано). Возможность такого представления термодинамического потенциала обусловлена специфическим характером энергии взаимодействия: это — либо парное взаимодействие, либо взаимодействие через квантовое поле. Удобно рассматривать эти два случая порознь.

а) Взаимодействие через квантовое поле ¹⁾. В соответствии с § 6 гамильтониан системы в этом случае имеет вид

$$H' = H'_p + H_f + H_{pf}, \quad (12.1)$$

причем в соответствии с (6.17)

$$H_{pf} = -g \int dx \bar{a}(x) \Gamma^{(0)} a(x) \Phi(x) \equiv gh. \quad (12.2)$$

¹⁾ См. [1], [2].

Оператор h не содержит константы связи g . Момент времени, к которому относятся гейзенберговские операторы a , $\bar{a}$, Φ , в (12.1) и (12.2) не существен (H' — интеграл движения). В дальнейшем мы будем для удобства считать его равным нулю.

Согласно (1.6)

$$\Omega = -\beta^{-1} \ln \text{Spur } e^{-\beta H'}. \quad (12.3)$$

Положим

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega_{pf}, \quad (12.4)$$

где

$$\Omega_0 = -\beta^{-1} \ln \text{Spur } e^{-\beta (H'_p + H'_f)}. \quad (12.5)$$

Очевидно, Ω_0 есть термодинамический потенциал системы невзаимодействующих частиц (как правило, эта величина легко вычисляется). Дифференцируя (12.3) по g , мы получаем

$$\frac{\partial \Omega}{\partial g} = \langle h \rangle = \frac{1}{g} \langle H_{pf} \rangle. \quad (12.6)$$

Принимая во внимание условие $\Omega \xrightarrow{g \rightarrow 0} \Omega_0$, находим отсюда

$$\Omega_{pf} = \int_0^g \frac{dg'}{g'} \langle H_{pf} \rangle, \quad (12.7)$$

причем среднее значение $\langle H_{pf} \rangle$ в (12.7) надлежит вычислять при константе связи, равной g' . При $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) эта формула дает сдвиг ΔE_0 энергии основного состояния системы за счет взаимодействия частиц с квантовым полем. Следует, однако, обратить внимание на существенную разницу между выражениями для ΔE_0 и Ω_{pf} . В первом случае формула (12.7) (при $\beta \rightarrow \infty$) дает явное представление ΔE_0 ; в то же время Ω_{pf} определяется равенством (12.7) лишь неявно, ибо среднее значение $\langle H_{pf} \rangle$ само зависит от Ω . Заметим, что, вообще говоря, в (12.7) входит и энергия самодействия. В некоторых задачах (например, при исследовании взаимодействия электронов с фононами) она представляет реальный физический интерес, и тогда выражением (12.7) можно пользоваться непосредственно. В ряде случаев, однако, энергия самодействия не имеет отношения к рассматриваемым проблемам и должна быть исключена. Так, например, обстоит

дело в задаче о системе частиц с электромагнитным, в частности кулоновским, взаимодействием. Операцию исключения собственной энергии мы будем в дальнейшем обозначать символом [...]'.

Подставим теперь в (12.7) явное выражение (12.2) для гамильтониана взаимодействия. Получим

$$\Omega_{pf} = - \int_0^g \frac{dg'}{g'} \int dx g' \langle \bar{a}(x) \Gamma^{(0)} a(x) \Phi(x) \rangle. \quad (12.8)$$

Это выражение можно преобразовать в двух направлениях.

Во-первых, представим $\langle \bar{a}(x) a(x) \Phi(x) \rangle$ в спектральном виде (явно указывая спинорные индексы s, s')

$$\langle \bar{a}(x, s) a(x, s') \Phi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(x, s, s'; E) dE. \quad (12.9)$$

Тогда

$$\Omega_{pf} = - \int_0^g dg' \int dx \int_{-\infty}^{+\infty} dE \Gamma^{(0)}(s, s') J(x, s, s'; E). \quad (12.10)$$

Поскольку операторы $\bar{a}a$ и Φ , взятые в один и тот же момент времени, перестановочны, все произведение $\bar{a}a\Phi$ есть эрмитовский оператор, и, следовательно, интеграл $\int dE J(x, s, s'; E)$ веществен. Таким образом, Ω_{pf} оказывается вещественной величиной, как это, конечно, и должно быть.

Применяя формулы (12.8), (12.10) к системе заряженных частиц (взаимодействующих через электромагнитное поле), следует принять во внимание еще условие нейтральности системы в целом. Иначе говоря, надо принять во внимание взаимодействие рассматриваемых частиц не только друг с другом (через поле), но и с полем классических источников — носителей компенсирующего заряда. Соответствующий гамильтониан есть

$$- \int dx i^a(x) \tilde{A}_a(x),$$

Здесь l^a — 4-вектор плотности тока; мы не используем для него обозначения J^a , употребляемого в других местах этой книги, дабы избежать смешения со спектральной функцией. Добавляя это выражение к правой части (12.10) и принимая во внимание формулу (6.18) для $\Gamma^{(0)}$, мы получаем

$$\Omega_{pf} = - \int_0^e d\epsilon' \int dx \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dE \gamma^a [J_a(x, E)]' + l^a(x) \tilde{A}_a(x) \right\}. \quad (12.11)$$

Спектральная функция в данном случае, очевидно, представляет собой 4-вектор J_a .

Во-вторых, желая выразить Ω_{pf} через введенные в § 9 массовый и поляризационный операторы, перепишем (12.8) в виде

$$\Omega_{pf} = - \int_0^g \frac{dg'}{g'} \int dx \delta(x_0) g' \langle \bar{a}(x) \Gamma^{(0)} a(x) \Phi(x) \rangle. \quad (12.12)$$

Среднее значение тройного произведения преобразуется по образцу (8.4) и (9.1) — (9.6); таким путем получаем (явно указывая шпур по спиновым индексам)

$$\begin{aligned} g' \text{Sp} \langle \bar{a}(x) \Gamma^{(0)} a(x) \Phi(x) \rangle &= \\ &= - g' \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0}} \text{Sp} \Gamma^{(0)} \langle T \{ a(x) \bar{a}(x') \Phi(x) \} \rangle = \\ &= g' \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0 \\ i \rightarrow 0}} \text{Sp} \Gamma^{(0)} \left\{ \langle S \rangle \frac{\delta G_c(x, x')}{\delta i(x)} + i G_c(x, x') \tilde{\Phi}(x) \right\} = \\ &= \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0}} \text{Sp} \left\{ -i \int dy M(x, y) G_c(y, x') + \right. \\ &\quad \left. + i g' \Gamma^{(0)} G_c(x, x') \tilde{\Phi}(x) \right\}. \quad (12.13) \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\Omega_{pf} = - \int_0^g \frac{dg'}{g'} \int dx \delta(x_0) \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0}} \text{Sp} \left\{ -i \int dy M(x, y) \times \right. \\ \left. \times G_c(y, x') + i g' \Gamma^0 G_c(x, x') \tilde{\Phi}(x) \right\}. \quad (12.14)$$

Для системы заряженных частиц мы получаем, подобно (12.11),

$$\Omega_{pf} = i \int dx dy \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0}} \int_0^e \frac{de'}{e'} \delta(x_0) \text{Sp} [M(x, y) G_c(y, x')] - \\ - \int_0^e \frac{de'}{e'} \int dx \delta(x_0) \{ i e' \text{Sp} \gamma^a G_c(x, x) \tilde{A}_a(x) + \\ + i^\mu(x) \tilde{A}_\mu(x) \}. \quad (12.15)$$

Выражение $G_c(x, x)$ определяется по правилу (5.5). Заметим, что, как легко убедиться из сравнения (9.5а) и (9.13), последнее слагаемое в правой части (12.15) тождественно равно

$$i \int dx dy \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0}} \int_0^e \frac{de'}{e'} \delta(x_0) [\mathcal{P}^{\alpha\beta}(x, y) D'_{c, \alpha\beta}(y, x')]. \quad (12.15a)$$

Рассмотрим особо пространственно однородный случай. Положим, как обычно,

$$G_c(x, y) = \int dp G_c(p) e^{-i(p, x-y)}, \\ M(x, y) = \int dp M(p) e^{-i(p, x-y)}. \quad (12.16)$$

Подставляя (12.16) в (12.14), проинтегрируем сначала по y и x_0 . Получим

$$\int dx dy \delta(x_0) \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x_0 > x_0}} M(x, y) G_c(y, x') = \\ = (2\pi)^4 \lim_{t \rightarrow 0, t < 0} \int dp M(p) G_c(p) e^{-i p_0 t} \int dx.$$

Последний интеграл здесь дает объем системы V . Расходимость при $V \rightarrow \infty$ совершенно естественна: мы вычисляем полный (а не отнесенный к одной частице) термодинамический потенциал, т. е. экстенсивную величину. Таким образом, для первых слагаемых в правых частях (12.14) и (12.15) мы получаем

$$(2\pi)^4 iV \int_0^g \frac{dg'}{g'} \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \text{Sp} \int dp [M(p) G_c(p) e^{-ip_0 t}]'. \quad (12.17)$$

Второе слагаемое в (12.15) для пространственно однородной системы с электромагнитным взаимодействием следует вычеркнуть в силу условия нейтральности. Из других систем представляет физический интерес либо система электронов, взаимодействующих с фононами, либо ансамбль нейтральных частиц, парное взаимодействие между которыми формально описывается некоторым квантовым полем (см. § 8). В обоих этих случаях $\Gamma^{(0)} = 1$, и второе слагаемое в правой части (12.14) принимает вид

$$-i \int_0^g dg' \int dx \delta(x_0) n(x) \tilde{\Phi}(x), \quad (12.18)$$

где $n(x)$ — средняя концентрация частиц в точке x [см. (5.4)]. В рассматриваемом случае пространственно однородной системы $n(x) = n = \text{const}$; далее, при $i = 0$ равенство (10.3а) дает с учетом (5.5)

$$\tilde{\Phi}(x, g') = -ng' \int dp dy f(x) e^{-i(p, x-y)} D_c'^{(0)}(p). \quad (12.19)$$

Поскольку, как уже отмечалось в § 6, $f(x)$ есть либо константа, либо дифференциальный оператор, мы имеем

$$f(x) e^{-i(p, x-y)} = f(p) e^{-i(p, x-y)},$$

где $f(p)$ получается из оператора $f(x)$ заменой

$$-i \frac{\partial}{\partial x_i} \rightarrow p_i \quad (i = 1, 2, 3); \quad i \frac{\partial}{\partial x_0} \rightarrow p_0.$$

Таким образом,

$$\tilde{\Phi}(x, g') = -ng' (2\pi)^4 [f(p) D_c'^{(0)}(p)]_{p=0}. \quad (12.20)$$

и выражение (12.18) принимает вид

$$\frac{1}{2} g^2 n^2 (2\pi)^4 V [f(p) D_c'^{(0)}(p)]_{p=0}.$$

Окончательно мы получаем

$$\begin{aligned} \Omega_{pf} = (2\pi)^4 iV \int_0^g \frac{dg'}{g'} \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \text{Sp} \int dp [M(p) G_c(p) e^{-i\rho_0 t}]' + \\ + \frac{g^2 n^2}{2} (2\pi)^4 V [f(p) D_c'^{(0)}(p)]_{p=0}. \end{aligned} \quad (12.21)$$

Подчеркнем еще раз, что для пространственно однородных систем заряженных частиц с электромагнитным взаимодействием второе слагаемое в правой части (12.21) писать не надо. Для систем бозе-частиц, взаимодействующих через поле, в формулах (12.14) — (12.21) следует изменить знаки слагаемых, содержащих массовый оператор.

б) Прямое взаимодействие между частицами ¹⁾. Гамильтониан системы частиц с прямым взаимодействием согласно § 6 имеет вид

$$H' = H_p' + H_{\text{int}}, \quad (12.22)$$

где операторы H_p' и H_{int} даются соответственно формулами (6.7) и (6.8).

Можно и в этом случае получить для термодинамического потенциала Ω формулу типа (12.14). Но мы дадим здесь выражение для Ω другого типа, которое, в частности, позволит связать Ω с собственными значениями эффективного волнового уравнения (9.18). Для этой цели продифференцируем равенство (12.3) по β , считая все прочие параметры неизменными. Получим

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \beta} = -\beta^{-1} \Omega + \beta^{-1} \langle H' \rangle, \quad (12.23)$$

где, как всегда, $\langle H' \rangle$ есть средняя энергия

$$\langle H' \rangle = \text{Spur} \{ e^{\beta \Omega - \beta H'} H' \}. \quad (12.24)$$

Это есть, очевидно, не что иное, как внутренняя энергия системы в обычном термодинамическом смысле слова, а равен-

¹⁾ См. [3], [2].

ство (12.23) представляет собой обычное уравнение Гиббса — Гельмгольца.

В силу (12.23) мы имеем

$$\Omega = \beta^{-1} \int_{\beta_m}^{\beta} d\beta' \langle H'(\beta') \rangle + C\beta^{-1}, \quad (12.25)$$

где аргумент β' у H' под знаком интеграла означает, что надо вычислять среднюю энергию при температуре $T' = \frac{1}{k\beta'}$.

C, β_m — постоянные.

Заметим, что величина $\langle H' \rangle$ есть функция переменных μ, T, V . Характеристической функцией в этих переменных является термодинамический потенциал Ω , для вычисления которого мы и будем использовать $\langle H' \rangle$ согласно (12.25).

Легко убедиться, что при $T \rightarrow 0$ (т. е. при $\beta \rightarrow \infty$) правая часть (12.25), как и должно быть, превращается в энергию основного состояния системы. Действительно, будем вычислять шпур в системе собственных функций гамильтониана H' (собственные значения H' , как и в §§ 2—4, обозначим через E_n). Тогда мы получим на основании (12.25)

$$\begin{aligned} \Omega &= \beta^{-1} \sum_n \int_{\beta_m}^{\beta} d\beta' e^{\beta'(\Omega - E_n)} E_n + \beta^{-1} C = \\ &= \beta^{-1} \sum_n E_n \frac{e^{\beta(\Omega - E_n)} - e^{\beta_m(\Omega - E_n)}}{\Omega - E_n} + \frac{C}{\beta} \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} E_0. \end{aligned}$$

Естественно, заранее делается предположение, что Ω есть конечная величина, не равная тождественно нулю.

Формула (12.25) сводит задачу о вычислении Ω к нахождению средней энергии $\langle H' \rangle$. Согласно (6.7) и (6.8) мы имеем

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle &= \int d\lambda d\lambda' \langle \lambda' | T + V - \mu | \lambda \rangle \langle \bar{a}(\lambda') a(\lambda) \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \int d\lambda' d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 \langle \lambda', \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2 \rangle \times \\ &\times \langle \bar{a}(\lambda') \bar{a}(\lambda_1) a(\lambda_2) a(\lambda_3) \rangle. \quad (12.26) \end{aligned}$$

На основании (5.2) и (7.6) это можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle = & i \int d\lambda d\lambda' (\lambda' | T + V - \mu | \lambda) \lim_{\substack{x'_0 \rightarrow x_0 \\ x'_0 > x_0}} G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) + \\ & + \frac{i}{2} \int d\lambda' d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 (\lambda', \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2) \times \\ & \times \lim_{\substack{x'_0 \rightarrow x_0 \\ x'_0 > x_0}} G_{2,c}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, x_0; \lambda', x'_0). \end{aligned} \quad (12.27)$$

Функцию Грина $G_{2,c}$ выразим с помощью уравнения (7.7) через одночастичную функцию Грина и производную от нее по времени. При $x'_0 \neq x_0$:

$$\begin{aligned} \int d\lambda' d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 (\lambda', \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2) G_{2,c}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, x_0; \lambda', x'_0) = \\ = \int d\lambda' \left\{ i \frac{\partial G_c(\lambda', x_0; \lambda', x'_0)}{\partial x_0} - \right. \\ \left. - \int d\lambda (\lambda' | T + V - \mu | \lambda) G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) \right\}. \end{aligned}$$

Подставим это выражение в (12.27) и представим G_c в виде интеграла Фурье по времени. Получим

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle = & \frac{i}{2} \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} \int d\lambda' \left\{ E G_c(\lambda', \lambda'; E) + \right. \\ & \left. + \int d\lambda (\lambda' | T + V - \mu | \lambda) G_c(\lambda, \lambda'; E) \right\}. \end{aligned} \quad (12.28)$$

Эта формула приобретает особенно простой вид, если оператор $T + V - \mu$ диагонален. Пусть его собственные значения суть $W(\lambda) - \mu$. Тогда второе слагаемое в правой части (12.28) есть

$$\begin{aligned} \frac{i}{2} \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} \int d\lambda [W(\lambda) - \mu] G_c(\lambda, \lambda; E) = \\ = \frac{1}{2} \int d\lambda n(\lambda) [W(\lambda) - \mu]. \end{aligned}$$

Здесь в соответствии с (5.4)

$$n(\lambda) = i \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} G_c(\lambda, \lambda; E)$$

есть функция распределения по λ , нормированная на числа заполнения.

Таким образом, мы получаем

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle = \frac{1}{2} \int d\lambda n(\lambda) W(\lambda) - \frac{\mu N}{2} + \frac{i}{2} \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} \times \\ \times \int d\lambda E G_c(\lambda, \lambda; E), \quad (12.29) \end{aligned}$$

где N — полное число частиц в системе.

Производя выкладку, совершенно аналогичную только что описанной, легко убедиться, что эта формула справедлива и для системы бозе-частиц.

В пространственно однородном случае, когда можно положить $V(\mathbf{x}) = 0$, индекс λ представляет собой совокупность спинowego квантового числа s и трех компонент импульса $\mathbf{p}$. Формула (12.29) при этом принимает вид¹⁾

$$\begin{aligned} \frac{\langle H' \rangle}{V} = -\frac{n\mu}{2} + \\ + \frac{i}{2} \text{Sp} \int d\mathbf{p} \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} [W(\mathbf{p}) + E] G_c(\mathbf{p}, E). \quad (12.30) \end{aligned}$$

Здесь V — объем системы [не путать с потенциальной энергией частицы во внешнем поле $V(\mathbf{x})$!], а символ Sp , как всегда, обозначает шпур по спиновым индексам. При $T \rightarrow 0$ выражение (12.30) превращается в формулу для энергии основного состояния, полученную в работах [4]—[6] (мы воспользовались здесь приемом, предложенным в [6]).

¹⁾ Следует помнить, что $G_c(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; E) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') G_c(\mathbf{p}, E)$; при совпадении аргументов δ -функцию здесь следует интерпретировать как объем системы, деленный на $(2\pi)^3$. Формулу (12.30) легко получить также, записав (12.27) в координатном представлении и разлагая затем $G_c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$ в интеграл Фурье по координатам.

В условиях когда справедливы билинейные разложения (9.26), (9.32), равенство (12.29) позволяет выразить среднюю энергию (и, следовательно, термодинамический потенциал) через собственные значения эффективного волнового уравнения (9.18). Действительно, подставляя (9.26) или (9.32) в (12.29), мы получаем без труда

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle &= \frac{1}{2} \int d\lambda n(\lambda) [W(\lambda) - \mu] + \frac{1}{2} \int dE dv \frac{Z(E, v) E}{e^{\beta E \pm 1}} = \\ &= \int dE dv \frac{EZ(E, v)}{e^{\beta E \pm 1}} - \frac{1}{2} \int d\lambda dE dv \frac{Z(E, v)}{e^{\beta E \pm 1}} \times \\ &\quad \times \bar{\chi}(\lambda; E, v) [R - W(\lambda) - \mu] \chi(\lambda; E, v). \quad (12.31) \end{aligned}$$

В знаменателях знак плюс берется для фермиевской системы, знак минус — для бозевской. При этом

$$n(\lambda) = \int dE dv \int \frac{Z(E, v)}{e^{\beta E \pm 1}} |\chi(\lambda; E, v)|^2. \quad (12.32)$$

Интегрирование по E в формулах (12.31) — (12.32) производится по всему спектру эффективного волнового уравнения (9.18). Заметим, что в силу (9.29) интегралы по E, v в (12.31) пропорциональны полному числу частиц в системе, как это, конечно, и должно быть.

Еще одно полезное представление для средней энергии можно получить, несколько иначе группируя слагаемые в (12.26), а именно, полагая

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle &= \int d\lambda d\lambda' \langle \lambda' | T + V - \mu | \lambda \rangle \langle \bar{a}(\lambda') a(\lambda) \rangle + \\ &+ \int d\lambda' d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 \langle \lambda', \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2 \rangle \langle \bar{a}(\lambda') \bar{a}(\lambda_1) a(\lambda_2) a(\lambda_3) \rangle - \\ &- \frac{1}{2} \int d\lambda' d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 \langle \lambda', \lambda_1 | U | \lambda_3, \lambda_2 \rangle \langle \bar{a}(\lambda') \bar{a}(\lambda_1) a(\lambda_2) a(\lambda_3) \rangle. \end{aligned}$$

Первые два слагаемых здесь преобразуются точно так же, как и раньше, и в результате дают [ср. (12.28)]

$$i \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}}^{+\infty} \int dE e^{-iEt} \int d\lambda EG_c(\lambda, \lambda; E) \quad (12.33)$$

(λ — любые переменные). В условиях применимости формулы (9.26) это выражение принимает вид [ср. (12.31)]

$$\int dE dv \frac{EZ(E, v)}{e^{\beta E} \pm 1} = V \int dE dv \frac{Z'(E, v) E}{e^{\beta E} \pm 1} \quad (12.34)$$

(знак плюс для систем ферми-частиц, минус — для бозе-частиц). Здесь функция Z' определяется равенством (9.29) и интеграл в правой части (12.34) асимптотически при $V \rightarrow \infty$ не зависит от объема системы V . Для преобразования последнего слагаемого (которое мы временно обозначим буквой A) удобно воспользоваться координатным представлением. Тогда

$$\begin{aligned} A &= -\frac{1}{2} \int dx dx' U(x - x') \langle \bar{a}(x) \bar{a}(x') a(x') a(x) \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \int dx dx' U(x - x') \langle -\bar{a}(x') a(x') \bar{a}(x) a(x) + \\ &\quad + \delta(x - x') \bar{a}(x) a(x) \rangle = +\frac{1}{2} U(0) N - \\ &\quad - \frac{i}{2} \lim_{\substack{x'_0 \rightarrow x_0 \\ x_0 > x_0}} \int dx dx' U(x - x') G_{2,c}(x, x'). \end{aligned}$$

Здесь $G_{2,c}(x, x')$ — функция (5.24) при $x_1 = x_2 = x$, $x'_1 = x'_2 = x'$ (ее не следует смешивать с функцией $G_{2,c}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, x_0; \lambda', x'_0)$, которая определена формулой (7.6); в последней аргументы расставлены иначе). В системе заряженных частиц функция $U(x)$ обращается в бесконечность при $x \rightarrow 0$; соответствующее слагаемое, однако, представляет собой не энергию взаимодействия, а энергию самодействия частиц и его следует вычеркнуть. Формально этого можно добиться, вводя вместо $U(x)$ регуляризованное выражение по образцу известного предельного λ -процесса в квантовой электродинамике¹⁾ [7]. Опуская

¹⁾ Пусть, например, $U(x) = \frac{e^2}{r} = \frac{e^2}{2\pi^2} \int d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}}{k^2} (r = |\mathbf{x}|)$.

Заменим коэффициенты Фурье $\frac{1}{2\pi^2 k^2}$ регуляризованным выражением $\frac{\cos k\lambda}{2\pi^2 k^2}$, где λ — малая величина ($\lambda > 0$). Тогда получим

$$U_{\text{рег}} = \frac{e^2}{2r} \left(1 + \frac{r - \lambda}{|r - \lambda|} \right) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \begin{cases} \frac{e^2}{r}, & r \neq 0, \\ 0, & r = 0. \end{cases}$$

слагаемое $\frac{1}{2} NU(0)$ и вводя обычным способом фурье-образ $G_{2,c}(x, x'; E)$, получаем

$$A = -\frac{i}{2} \lim_{\substack{t \leq 0 \\ t \rightarrow 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} \int dx dx' U(x-x') G_{2,c}(x, x'; E). \quad (12.35)$$

В условиях применимости билинейной формулы (9.44) интегрирование по E легко выполняется, и равенство (12.35) принимает вид

$$A = \frac{1}{2} \int dE dv Z_2(E, v) n_B(E) \times \\ \times \int dx dx' U(x-x') \chi_2(x, x; E, v) \bar{\chi}_2(x', x'; E, v). \quad (12.36)$$

Положим по определению

$$\frac{1}{2} Z_2(E, v) \int dx dx' U(x-x') \chi_2(x, x; E, v) \bar{\chi}_2(x', x'; E, v) = \\ = VEZ'_2(E, v). \quad (12.37)$$

Комбинируя формулы (12.34), (12.36) и (12.37), находим окончательно

$$\frac{\langle H' \rangle}{V} = \int dE dv \frac{EZ'(E, v)}{e^{\beta E} \pm 1} + \int dE' dv' \frac{E'Z'_2(E', v')}{e^{\beta E} - 1}. \quad (12.38)$$

Первое слагаемое здесь формально совпадает с выражением для удельной средней энергии идеального газа (Бозе или Ферми); второе слагаемое есть формально удельная средняя энергия некоторого идеального бозе-газа. Напомним в связи с этим, что переменные v, E и v', E' в первом и втором слагаемых имеют, вообще говоря, разный смысл [см. (9.26) и (9.44)]. Различны и области интегрирования по E и E' . Поскольку спектральная функция, принадлежащая $G_{2,c}$, асимптотически при $V \rightarrow \infty$ не зависит от V , то же справедливо и для Z'_2 .

Для термодинамического потенциала мы получаем на основании (12.25) при $\beta_m \rightarrow 0$ и (12.38)

$$\frac{\Omega}{V} = C\beta^{-1} - \beta^{-1} \int_{\beta}^{\infty} d\beta' \left\{ \int dE dv \frac{EZ'(E, v)}{e^{\beta'E} \pm 1} + \right. \\ \left. + \int dE' dv' \frac{E'Z_2'(E', v')}{e^{\beta'E} - 1} \right\}. \quad (12.39)$$

Как показано в работах [27], [28]¹⁾, в известных условиях $\delta\Omega/\delta M = 0$. При этом выражение (12.39) превращается в обычную формулу для термодинамического потенциала двух идеальных газов

$$\frac{\Omega}{V} = \frac{C'}{\beta} \mp \beta^{-1} \int dE dv Z'(E, v) \ln(1 \pm e^{-\beta E}) + \\ + \int dE' dv' Z_2(E', v') \ln(1 - e^{-\beta E'}) \quad (12.40)$$

(верхний и нижний знаки соответственно для систем ферми- и бозе-частиц).

Представление типа (12.25), (12.31) можно получить и для термодинамического потенциала системы частиц, взаимодействующих с квантовым полем. Именно, рассуждая совершенно так же, как и выше, легко находим для этого случая (в условиях применимости (9.26))

$$\langle H' \rangle = \langle H'_p \rangle + \langle H_f \rangle + \langle H_{pf} \rangle = \int dE dv \frac{EZ(E, v)}{e^{\beta E} \pm 1} + \langle H_f \rangle, \quad (12.41)$$

где E — собственные значения эффективного волнового уравнения для корпускулярной функции Грина. Среднее значение $\langle H_f \rangle$ также можно выразить через функции Грина; однако для систем этого типа, по-видимому, удобнее пользоваться формулой (12.21).

Отметим в заключение, что в развитой здесь методике не возникает никаких трудностей с зависимостью Ω (и, следовательно, энергии основного состояния E_0) от объема системы V . Действительно, как отмечалось в § 10, при $V \rightarrow \infty$ уравнения для функций Грина не содержат V . Поэтому

¹⁾ Авторы признательны А. Клейну за присылку препринта работы [28].

асимптотически вся зависимость от объема дается множителем V в формулах типа (12.21), (12.30). Соответственно можно непосредственно определить асимптотически не зависящие от объема удельные величины (термодинамический потенциал, отнесенный к единице объема или к одной частице), и этим решается вторая задача, сформулированная во Введении.

§ 13. Корреляционные функции¹⁾

На основании результатов §§ 1—3 корреляционные функции различных типов непосредственно выражаются через предельные значения соответствующих функций Грина. В настоящем параграфе мы рассмотрим некоторые представления для корреляционных функций с помощью функциональных производных, а также исследуем более подробно важную для дальнейшего функцию временной корреляции токов.

По определению (5.2) и (1.2)

$$G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) = i \operatorname{Sp} e^{\beta Q - \beta H'} T \{ a(\lambda, x_0) \bar{a}(\lambda', x'_0) \}. \quad (13.1)$$

Напомним, что оператор H' представляет собой обобщенный гамильтониан

$$H' = H - \mu N.$$

Представим фигурирующий здесь оператор полного числа частиц N в виде

$$N = \int d\lambda'' \bar{a}(\lambda'', x_0) a(\lambda'', x_0). \quad (13.2)$$

Оба оператора H и N следует взять в один и тот же момент времени — безразлично, какой именно: как всегда, мы рассматриваем случай, когда операторы H и N , взятые в один и тот же момент времени, коммутируют. Произведем в (13.1) формальную замену $\beta\mu \rightarrow F(\lambda'', \lambda''') + \beta\mu$ и соответственно

$$\beta\mu N \rightarrow \beta\mu N + \int d\lambda'' d\lambda''' F(\lambda'', \lambda''') \bar{a}(\lambda'', x_0) a(\lambda''', x_0). \quad (13.3)$$

Полученную таким путем функцию обозначим через $G'_c(F)$; очевидно,

$$G_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0) = \lim_{F \rightarrow 0} G'_c(\lambda, x_0; \lambda', x'_0; F). \quad (13.4)$$

¹⁾ См. [1], [6], [8].

Для краткости мы будем в дальнейшем в этом параграфе говорить просто о предельном переходе и писать символ $\lim$, не указывая явно условия $F \rightarrow 0$. Непосредственно видно, что функциональное дифференцирование G' по F дает, во-первых, слагаемое вида $\beta \frac{\delta \Omega}{\delta F(\lambda'', \lambda''')} G'$ и, во-вторых, функцию Грина более высокого порядка, содержащую четыре оператора $\bar{a}$, a под знаком усреднения¹⁾. Последняя связана с оператором ρ_2 ; таким путем легко находим, выполняя обычный предельный переход:

$$\begin{aligned} & (\lambda_1, \lambda_2 | \rho_2 | \lambda'_2, \lambda'_1) = \\ & = \left[\rho_1(\lambda'_1, \lambda'_2) \rho_1(\lambda_2, \lambda_1) - \delta(\lambda'_2 - \lambda_2) \rho_1(\lambda'_1, \lambda_1) + \lim \frac{\delta \rho'_1(\lambda_2, \lambda_1)}{\delta F(\lambda'_1, \lambda'_2)} \right]_{a, s}. \end{aligned} \quad (13.5)$$

Здесь символ $[\dots]_{a, s}$ означает, что по индексам λ'_1, λ'_2 и λ_1, λ_2 выражение в скобках надлежит подвергнуть антисимметризации или симметризации в зависимости от того, являются ли операторы $\bar{a}$, a фермиевскими или бозевскими; функция ρ'_1 связана с G'_c так же, как ρ_1 связана с G_c . Матрица ρ_2 описывает корреляции по любым переменным λ в данный момент времени.

Рассмотрим, в частности, корреляционную функцию по импульсам в пространственно однородной и изотропной системе без спинowego взаимодействия. В качестве λ здесь удобно выбрать три компоненты импульса $\mathbf{p}$ и спиновую координату s . Воспользуемся дискретным импульсным представлением (т. е. будем считать, что система заключена в большом «кубе периодичности» объема V) и введем средние числа заполнения $n(\mathbf{p}, s)$ состояний $(\mathbf{p}, s)$. Матрица ρ_1 при этом, очевидно, диагональна по спиновым переменным, и вместо (13.3) можно произвести замену

$$\beta \mu N \rightarrow \beta \mu N + \sum_{\mathbf{p}, s} F(\mathbf{p}, s) \bar{a}(\mathbf{p}, s) a(\mathbf{p}, s).$$

¹⁾ Это есть частный случай общей двухчастичной функции Грина, соответствующий специальному распределению операторов $\bar{a}$, a по временам.

Специализируя формулу (13.5) на этот случай, получаем

$$\begin{aligned} \rho_2(\mathbf{p}', s'; \mathbf{p}, s) &\equiv \langle \bar{a}(\mathbf{p}', s') \bar{a}(\mathbf{p}, s) a(\mathbf{p}, s) a(\mathbf{p}', s') \rangle = \\ &= n(\mathbf{p}, s) n(\mathbf{p}', s') - \Delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \Delta(s' - s) n(\mathbf{p}, s) + \\ &\quad + \lim \frac{\partial n'(\mathbf{p}, s)}{\partial F(\mathbf{p}', s)}, \quad (13.6) \end{aligned}$$

где Δ есть дельта-функция дискретного аргумента. В частности, для идеального электронного газа, когда числа заполнения даются обычной функцией Ферми, равенство (13.6) принимает вид

$$\begin{aligned} \rho_2(\mathbf{p}', s'; \mathbf{p}, s) &= n(\mathbf{p}, s) n(\mathbf{p}', s') - \\ &\quad - \Delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \Delta(s - s') n^2(\mathbf{p}, s). \quad (13.7) \end{aligned}$$

Второе слагаемое в правой части (13.7) описывает «кинематическую» корреляцию, связанную с принципом Паули: вероятность обнаружить два электрона с одинаковыми импульсами и проекциями спина равна нулю. В остальном электроны движутся независимо друг от друга, что и естественно (идеальный газ). При наличии взаимодействия вид функции распределения $n(\mathbf{p}, s)$, вообще говоря, усложняется; при этом согласно формуле (13.6) появляется еще дополнительная (динамическая) корреляция по импульсам, обусловленная силами взаимодействия.

Аналогичным путем, произведя замену

$$\begin{aligned} \beta \mu N &\rightarrow \beta \mu N + \\ &+ \int F(\lambda'', \lambda'''; x_0'', x_0''') \bar{a}(\lambda'', x_0'') a(\lambda''', x_0''') d\lambda'' d\lambda''' dx_0'' dx_0''', \end{aligned}$$

можно получить и выражения для временных корреляционных функций. Непосредственно производится также обобщение на случай многочастичных корреляционных функций (для этого, очевидно, надо лишь взять функциональные производные более высокого порядка от G').

Для систем с прямым взаимодействием можно получить еще одно полезное представление бинарной корреляционной функции через функциональную производную от термодинамического потенциала Ω по потенциалу взаимодействия.

Действительно, мы имеем в этом случае согласно (12.3), (12.22), (6.7) и (6.8)

$$\Omega = -\beta^{-1} \ln \text{Spur} \exp \left\{ -\beta H'_p - \frac{\beta}{2} \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda'_1 d\lambda'_2 \times \right. \\ \left. \times (\lambda_1, \lambda_2 | U | \lambda'_2, \lambda'_1) \bar{a}(\lambda_1) \bar{a}(\lambda_2) a(\lambda'_2) a(\lambda'_1) \right\} \quad (13.8)$$

(все операторы $a, \bar{a}$ относятся к одному и тому же моменту времени — безразлично, какому именно). Отсюда

$$\frac{\delta \Omega}{\delta (\lambda_1, \lambda_2 | U | \lambda'_2, \lambda'_1)} = \frac{1}{2} \langle \bar{a}(\lambda_1) \bar{a}(\lambda_2) a(\lambda'_2) a(\lambda'_1) \rangle \equiv \\ \equiv \frac{1}{2} \rho_2(\lambda'_1, \lambda'_2; \lambda_2, \lambda_1). \quad (13.9)$$

Формула (13.9) особенно удобна для вычисления корреляционной функции по координатам в пространственно однородной системе. В этом случае в качестве λ удобно взять спиную и три пространственные координаты; оператор энергии взаимодействия имеет вид

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int dx dx' \sum_{s, s'} \bar{a}(x, s) \bar{a}(x', s') \times \\ \times U(x, x') a(x', s') a(x, s), \quad (13.10)$$

и следовательно,

$$\frac{\delta \Omega}{\delta U(x, x')} = \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \langle \bar{a}(x, s) \bar{a}(x', s') a(x', s') a(x, s) \rangle \equiv \\ \equiv \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} f(x - x'), \quad (13.11)$$

где

$$f(x - x') = \frac{V}{N^2} \sum_{s, s'} \langle \bar{a}(x, s) \bar{a}(x', s') a(x', s') a(x, s) \rangle. \quad (13.12)$$

Функция $f(x - x')$ описывает корреляцию в конфигурационном пространстве; постоянный множитель в правой части (13.12) подобран так, чтобы интеграл $\int f(x) dx$ был конечной величиной, асимптотически (при $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty$ $0 < \frac{N}{V} = n < \infty$) не зависящей от N и V . Таким образом,

$$f(x) = \frac{2V}{N^2} \frac{\delta \Omega}{\delta U(x)}. \quad (13.13)$$

Для термодинамического потенциала Ω можно воспользоваться одной из формул предыдущего параграфа.

Отметим, в частности, случай, когда прямое бинарное взаимодействие заменено взаимодействием с эффективным квантовым полем, гриновская функция которого определяется равенством (1.62). Тогда термодинамический потенциал Ω дается формулами (12.4), (12.21). Положим

$$D_c^{(0)}(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int D_c^{(0)}(x) e^{-i(k, x)} dx.$$

Принимая во внимание (12.15а) и выполняя варьирование, указанное в (13.13), мы получаем

$$\begin{aligned} f(x) = & i \frac{V^2}{N^2 g^2} \int_0^g \frac{dg'}{g'} \int dk e^{ikx} \times \\ & \times \frac{\partial}{\partial D_c^{(0)}(k)} \lim_{\substack{t \rightarrow 0 \\ t < 0}} \int dk' e^{-ik'_0 t} [\mathcal{P}(k', g') D_c(k', g')] + \frac{V^2}{N^2}. \end{aligned} \quad (13.14)$$

В случае систем заряженных частиц с электромагнитным взаимодействием последнее слагаемое писать не надо.

Из формулы (13.14) видно, что фурье-образ корреляционной функции $f(k)$ определяется в конечном счете полюсами функции Грина D_c . Но эти же полюсы, как мы знаем, определяют и некоторые ветви спектра элементарных возбуждений в системе. Таким образом, между видом корреляционной функции и спектром возбуждений имеется глубокая связь ¹⁾.

До сих пор в этом параграфе мы рассматривали только «одновременные» корреляционные функции, характеризующие взаимосвязь между вероятностями обнаружения тех или иных величин, взятых в один и тот же момент времени. Рассмотрим теперь один специальный случай двухвременных корреляционных функций, а именно корреляционную функцию плотностей тока ²⁾, взятых в различные моменты времени:

$$F_{II}^{(+)}(x, x') = \langle [j_I(x), j_I(x')]_+ \rangle. \quad (13.15)$$

¹⁾ Эта связь была впервые обнаружена Фейнманом [10] на конкретном примере жидкого гелия II.

²⁾ Мы имеем в виду только ток проводимости, но не спиновый ток.

Эта величина понадобится нам в дальнейшем в теории электропроводности. Ограничимся пространственно однородным и изотропным случаем. В применении к теории твердого тела последнее означает, что мы рассматриваем только кристаллы кубической системы. Тогда

$$F_{il}^{(+)}(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int dk e^{-iE(x_0 - x'_0) + i(k, x - x')} F_{il}^{(+)}(k, E). \quad (13.16)$$

В силу эрмитовости оператора $j_i(x)$ мы имеем, очевидно,

$$F_{il}^{(+)}(k, E) = F_{il}^{(+)}(-k, -E) = \bar{F}_{il}^{(+)}(k, E). \quad (13.17)$$

Далее, в силу (4.2)

$$\left. \begin{aligned} F_{il}^{(+)}(k, E) \in \text{Re}; \quad F_{il}^{(+)}(k, E) > 0, \\ F_{il}^{(+)}(k, E) = F_{il}^{(+)}(k, E). \end{aligned} \right\} \quad (13.18)$$

Таким образом, функцию $F_{il}^{(+)}(k, E)$ можно представить в виде

$$F_{il}^{(+)}(k, E) = \delta_{il} F_1(k^2, E^2) + (k_i k_l - k^2 \delta_{il}) F_2(k^2, E), \quad (13.19)$$

где

$$F_1 - k^2 F_2 \geq 0, \quad F_2 \geq 0 \quad (13.20)$$

(и, следовательно, $F_1 \geq 0$). В силу закона сохранения заряда функция $F_1(k^2, E^2)$ удовлетворяет одному важному тождеству (см. [9], [11]). Мы получим его, связав $F_{il}(k, E)$ с коммутатором плотностей тока и воспользовавшись уравнением непрерывности и хорошо известными правилами перестановки для плотностей заряда и тока, взятых в один и тот же момент времени. Прежде всего на основании (2.10) мы имеем

$$\begin{aligned} \langle [j_i(x), j_l(x')]_- \rangle &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int dk e^{-iE(x_0 - x'_0) + i(k, x - x')} \text{th} \left(\frac{\beta E}{2} \right) F_{il}^{(+)}(k, E) = \\ &= i \frac{\partial}{\partial x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int dk e^{-iE(x_0 - x'_0) + i(k, x - x')} \frac{\text{th} \frac{\beta E}{2}}{E} F_{il}^{(+)}(k, E). \end{aligned} \quad (13.21)$$

Далее, обозначим через $\rho(x)$ оператор плотности заряда¹⁾. В силу уравнения непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial x_l} \langle [j_l(x), j_l(x')]_- \rangle = - \left\langle \left[\frac{\partial \rho(x)}{\partial x_0}, j_l(x') \right]_- \right\rangle. \quad (13.22)$$

В сочетании с (13.21) и (13.19) это дает

$$\begin{aligned} \langle [\rho(x), j_l(x')]_- \rangle &= \\ &= -i \frac{\partial}{\partial x_l} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int dk e^{-iE(x_0-x'_0)+i(k, x-x')} \frac{\text{th} \frac{\beta E}{2}}{E} F_1(k^2, E^2). \end{aligned} \quad (13.23)$$

Положим в (13.23) $x'_0 = x_0$. Тогда коммутатор в левой части легко вычисляется.

Рассмотрим сначала простейший случай, когда оператор скорости есть просто $\mathbf{p}/m_0$ (m_0 — истинная масса частицы). Тогда

$$\langle [\rho(x, x_0), j_l(x', x_0)]_- \rangle = - \frac{ine^2}{m_0} \frac{\partial \delta(x-x')}{\partial x_l}, \quad (13.24)$$

где $n = \langle \rho(x) \rangle$ — постоянная (в силу условия однородности) плотность частиц.

Результат (13.24), однако, справедлив лишь в отсутствие внешних полей. Им нельзя пользоваться в теории твердого тела, где, благодаря периодическому полю решетки, величина n есть не константа, а периодическая функция координат. В ряде задач теории твердого тела периодический потенциал решетки можно явно исключить из рассмотрения [12]—[15], заменяя обычный оператор кинетической энергии $\mathbf{p}^2/2m_0$ оператором $T(\mathbf{p})$, представляющим энергию электрона в периодическом поле решетки. Здесь $\mathbf{p}$ есть квазиимпульс электрона; при переходе к координатному представлению $\mathbf{p}$ следует заменить на $-i\nabla_x$. При этом система в отсутствие дефектов решетки становится пространственно однородной, и n есть константа, но зато скорость

¹⁾ Смешения с операторами $\rho_1, \rho_2, \dots$ произойти не может, ибо последние всегда имеют индексы 1, 2, ..., s.

дается выражением

$$v_i(\mathbf{p}) = \frac{\partial T(\mathbf{p})}{\partial p_i} \left(\neq \frac{p_i}{m_0} \right).$$

Скорость $\mathbf{v}$, вообще говоря, не параллельна вектору $\mathbf{p}$ даже в кубическом кристалле, так как сама поверхность $T(\mathbf{p}) = \text{const}$ может иметь выделенные направления. Из соображений симметрии ясно, что в выражение для плотности тока j_i может входить лишь величина $v_i(\mathbf{p})$, усредненная по всем таким направлениям. Очевидно, ее можно представить в виде $p_i f(\mathbf{p}^2)$, где $f(\mathbf{p}^2)$ — некоторая скалярная функция (в частном случае, когда $T(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m_0$, имеем $f = 1/m_0$). Для интересующего нас коммутатора при этом получим

$$\langle [p(x, x_0), j_i(x', x_0)]_- \rangle = -ine^2 f(-\nabla_x^2) \frac{\partial \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\partial x_i}, \quad (13.24a)$$

и следовательно,

$$\begin{aligned} ne^2 f(-\nabla_x^2) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int dk e^{i(k, \mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\text{th} \frac{\beta E}{2}}{E} F_1(k^2, E^2). \end{aligned}$$

Поскольку $f(-\nabla_x^2) e^{ikx} = f(k^2) e^{ikx}$, это дает

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\text{th} \frac{\beta E}{2}}{E} F_1(k^2, E^2) = \frac{ne^2}{(2\pi)^3} f(k^2). \quad (13.25)$$

Отметим, в частности, случай квадратичной зависимости энергии от квазиимпульса

$$T(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^3 \frac{(p_i - p_i^{(0)})^2}{2m_i}. \quad (13.26)$$

Здесь $p_i^{(0)}$ — некоторые заданные числа, определяющие положение минимума энергии в зоне Бриллюэна, m_i — главные значения тензора эффективной массы. Вычисляя отсюда компоненты скорости $v_i(\mathbf{p})$ и производя указанное выше

усреднение, находим

$$f(p^2) = \frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_i}. \quad (13.27)$$

Соответственно формула (13.25) принимает вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\text{th} \frac{\beta E}{2}}{E} F_1(k^2, E^2) = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \frac{ne^2}{m^*}. \quad (13.28)$$

Замечательно, что правая часть (13.28) не зависит от k . Соотношение (13.25) и есть искомое тождество. Мы вывели его в предположении, что имеется лишь один тип заряженных частиц; обобщение на случай нескольких типов состоит в том, что правая часть (13.25) заменяется на

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \sum_a n_a e_a^2 f_a(k^2).$$

Индекс a здесь нумерует типы частиц, и суммирование производится по всем возможным его значениям. Тождество (13.25) послужит нам в дальнейшем (§ 14) исходным пунктом для вывода «правила сумм» в теории электропроводности.

Заметим в заключение, что, зная $F_{il}^{(+)}(x, x')$, можно определить и временную корреляционную функцию для плотностей заряда. Действительно, в силу уравнения непрерывности мы имеем [ср. (13.22)]

$$\frac{\partial^2}{\partial x'_i \partial x_i} \langle [j_i(x) j_i(x')]_+ \rangle = \left\langle \left[\frac{\partial \rho(x)}{\partial x_0}, \frac{\partial \rho(x')}{\partial x'_0} \right]_+ \right\rangle,$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} \langle [\rho(x), \rho(x')]_+ \rangle &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int d\mathbf{k} e^{-iE(x_0 - x'_0) + i(\mathbf{k}, \mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{k^2}{E^2} F_1(k^2, E^2). \end{aligned} \quad (13.29)$$

§ 14. Реакция системы на внешние воздействия. Представление через двухвременную функцию Грина ¹⁾

В этом и следующем параграфах мы покажем, что знание простейших функций Грина, определенных в условиях термодинамического равновесия, позволяет исследовать не только равновесные свойства системы, но и величины, характеризующие ее реакцию на всякого рода внешние воздействия. В частности, оказывается возможным вычислять потоки заряда, энергии и других величин, возникающие в системе при наложении электрического поля и т. д. Тем самым получаются формально замкнутые выражения для электропроводности и других кинетических коэффициентов.

Мы ограничимся случаем малых отклонений от равновесия, рассматривая внешнее воздействие как возмущение и вычисляя средние значения всех интересующих нас величин лишь в первом неисчезающем приближении.

Пусть на систему, находившуюся первоначально в состоянии термодинамического равновесия, начинает действовать адиабатически включающееся внешнее возмущение. Удобно выбрать начальный момент при $x_0 \rightarrow -\infty$; тогда часть гамильтониана ΔH , описывающую взаимодействие системы с возмущением, можно представить в виде

$$\Delta H = -A_m e^{-i\omega x_0 - \varepsilon |x_0|} C_1. \quad (14.1)$$

Здесь A_m есть c -число («амплитуда» внешнего воздействия), C_1 — некоторый оператор, зависящий от природы взаимодействия, но не зависящий от параметров λ . Обычно C_1 содержит интеграл по λ (см. ниже). Выбор ΔH в виде гармонически осциллирующей функции (14.1) не снижает общности рассмотрения, коль скоро мы ограничиваемся первым — линейным по ΔH — приближением.

Среднее значение некоторого оператора $C_2(x)$ в присутствии возмущения легко найти по общей формуле (1.2), причем статистический оператор ρ следует вычислять с учетом возмущения (14.1). Обозначим через H' гамильтониан системы в отсутствие возмущения; на основании (1.3) мы имеем

$$i \frac{\partial \rho}{\partial x_0} = H' \rho - \rho H' + \Delta H \rho - \rho \Delta H. \quad (14.2)$$

¹⁾ См. [9], [11], [16] — [18].

Пусть ρ_0 есть статистический оператор в отсутствие возмущения, характеризующий систему в состоянии термодинамического равновесия. В дальнейшем для краткости мы будем его именовать просто равновесным статистическим оператором. Очевидно, $[\rho_0, H']_- = 0$. Положим

$$\rho = \rho_0 + \Delta\rho \quad (14.3)$$

и ограничимся членами первого порядка по $\Delta\rho$, ΔH . Принимая во внимание граничное условие $\rho \xrightarrow{x_0 \rightarrow -\infty} \rho_0$, из (14.2) мы получаем

$$\Delta\rho = -i \int_{-\infty}^{x_0} e^{-iH'(x_0-x'_0)} [\Delta H, \rho_0]_- e^{iH'(x_0-x'_0)} dx'_0. \quad (14.4)$$

Следовательно, для среднего значения некоторого оператора $C_2(x_0)$ в момент времени x_0 согласно (1.2) будем иметь

$$\tilde{C}_2(x_0) = \tilde{C}_2^{(0)}(x_0) - i \int_{-\infty}^{x_0} \langle [C_2(x_0), \Delta H(x'_0)]_- \rangle dx'_0. \quad (14.5)$$

Здесь $\tilde{C}_2^{(0)}$ есть среднее значение C_2 в отсутствие возмущения (при $A_m = 0$), и имеются в виду операторы, гейзенберговские относительно невозмущенного гамильтониана H' . Для краткости мы не пишем индексов λ , могущих характеризовать оператор C_2 , а указываем лишь момент времени, к которому относится C_2 . Естественно, и усреднение производится по невозмущенному ансамблю, характеризующему оператором ρ_0 .

Вспоминая определение запаздывающей функции Грина (3.2), мы получаем из (14.5)

$$\begin{aligned} \tilde{C}_2(x_0) &= \tilde{C}_2^{(0)}(x_0) + \\ &+ i \int_{-\infty}^{+\infty} dx'_0 A_m e^{-i\omega x'_0} (x_0 - x'_0) \langle [C_2(x_0), C_1(x'_0)]_- \rangle e^{-\varepsilon |x_0|} = \\ &= \tilde{C}_2^{(0)}(x_0) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx'_0 A_m e^{-i\omega x'_0} \langle \langle C_2(x_0) | C_1(x'_0) \rangle \rangle_r^{(-)}. \end{aligned} \quad (14.6)$$

Поскольку функция Грина $\langle \langle C_2(x_0) | C_1(x'_0) \rangle \rangle_r^{(-)} \equiv K_{21,r}^{(-)}(x_0, x'_0)$ при учете диссипативных процессов неизбежно затухает со

временем, можно сразу положить $\varepsilon = 0$. Полагая далее

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} K_{21,r}^{(-)}(x_0, x'_0) = K_{21,r}^{(-)}(E), \quad (14.7)$$

находим

$$\tilde{C}_2(x_0) = \tilde{C}_2^{(0)}(x_0) + \chi(\omega) A_m e^{-i\omega x_0}. \quad (14.8)$$

Здесь

$$\chi(\omega) = i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \theta(t) \langle [C_2(x_0), C_1(x'_0)]_- \rangle e^{i\omega t}, \quad (14.9)$$

т. е.

$$\chi(\omega) = 2\pi K_{21,r}^{(-)}(E) \big|_{E=\omega}. \quad (14.10)$$

Величина $\chi(\omega)$ иногда называется комплексным адмиттансом системы. С помощью формул (3.7) и (2.10) легко выразить $\chi(\omega)$ непосредственно через спектральные функции, соответствующие коммутатору или антикоммутатору операторов C_2 и C_1 :

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{J_{21}^{(-)}(E)}{E - \omega - i\varepsilon} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\text{th}\left(\frac{\beta E}{2}\right) J_{21}^{(+)}(E)}{E - \omega - i\varepsilon}. \quad (14.11)$$

Таким образом, величины, описывающие реакцию системы на произвольное внешнее воздействие (в частности, и поглощение энергии системой), непосредственно выражаются через временные корреляционные функции для соответствующих операторов C_1 и C_2 .

Особенно интересен случай $C_1 = C_2$. Тогда корреляционная функция

$$K^{(+)}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} J^{(+)}(E)$$

описывает временную эволюцию спонтанных флуктуаций величины, описываемой оператором $C_2(x_0)$ в условиях термодинамического равновесия. В силу (14.8) и (14.9) она же в конце концов определяет и диссипацию энергии внешнего поля в данной системе. Это обстоятельство составляет

содержание так называемой «флуктуационно-диссипационной теоремы» [19].

В приложениях, как правило, интересен случай, когда оператор C_2 эрмитов (оператор C_1 , конечно, всегда эрмитов). Тогда, очевидно, $J^{(+)}(E) = \bar{J}^{(+)}(-E)$, и, как легко усмотреть из (14.11), то же справедливо и для адмиттанса

$$\operatorname{Re} \chi(\omega) = \operatorname{Re} \chi(-\omega), \quad (14.12)$$

$$\operatorname{Im} \chi(\omega) = -\operatorname{Im} \chi(-\omega). \quad (14.13)$$

Если, сверх того, спектральная функция оказывается еще и вещественной, то для $K_{21,r}^{(\pm)}(\lambda)$ справедливы дисперсионные соотношения § 4. Отделяя в (14.11) вещественную часть от мнимой, мы получаем в этом случае

$$\operatorname{Re} \chi(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \operatorname{th} \frac{\beta E}{2} \mathcal{P} \frac{J_{21}^{(+)}(E)}{E - \omega}, \quad (14.14)$$

$$\operatorname{Im} \chi(\omega) = \pi \operatorname{th} \frac{\beta \omega}{2} J_{21}^{(+)}(\omega), \quad (14.15)$$

$$\operatorname{Re} \chi(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} \chi(E)}{E - \omega}, \quad (14.16)$$

$$\operatorname{Im} \chi(\omega) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{P} \frac{\operatorname{Re} \chi(E)}{E - \omega}. \quad (14.16a)$$

Дисперсионные соотношения (14.16), (14.16a), как и аналогичные равенства в § 4, написаны в предположении, что $\operatorname{Im} \chi(E)$ достаточно быстро убывает с увеличением $|E|$, и интеграл сходится. (Именно такая ситуация типична для задач статистической физики.) Если бы это условие не выполнялось, пришлось бы прибегнуть к вычитательной процедуре, развитой в связи с задачами квантовой теории поля [20] (в простейшем случае это свелось бы к появлению в (14.16) разности $\operatorname{Im} \chi(E) - \operatorname{Im} \chi(\infty)$).

Формулы (14.9), (14.10) описывают реакцию системы на внешнее воздействие любой физической природы; требуется лишь, чтобы соответствующий гамильтониан взаимодействия можно было представить в форме (14.1). Специа-

лизируем теперь эти выражения для двух важных частных случаев, относящихся к поведению системы, соответственно в однородном магнитном и однородном электрическом полях.

Пусть для начала

$$\Delta H = -M_i \mathcal{H}_i(x_0), \quad (14.17)$$

где M_i — магнитный момент единицы объема, а $\mathcal{H} = \mathcal{H}_m e^{-i\omega x_0}$ — напряженность внешнего магнитного поля. Очевидно, роль оператора C_1 в данном случае играет вектор $\mathbf{M}$; он же представляет собой и оператор C_2 , ибо нас интересует именно средняя намагниченность в образце. Адмиттанс $\chi(\omega)$ в данном случае есть не что иное, как тензор комплексной магнитной восприимчивости $\chi_{ij}(\omega)$. Поскольку магнитный момент есть аддитивный оператор

$$M_i(x_0) = \int d\lambda d\lambda' (\lambda | M_i | \lambda') \bar{a}(\lambda, x_0) a(\lambda', x_0),$$

формула (14.10) дает выражение $\chi_{ij}(\omega)$ через двухчастичную функцию Грина типа (5.25)

$$\chi_{ij}(\omega) = 2\pi \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda'_1 d\lambda'_2 (\lambda_2 | M_j | \lambda'_2) (\lambda_1 | M_i | \lambda'_1) \times \\ \times G_{2,r}^{(-)}(\lambda_1, \lambda'_1; \lambda_2, \lambda'_2; \omega), \quad (14.18)$$

$$G_{2,r}^{(-)}(\lambda_1, \lambda'_1; \lambda_2, \lambda'_2; E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \theta(t) \langle [\bar{a}(\lambda_1, x_0) a(\lambda'_1, x_0), \\ \bar{a}(\lambda_2, x'_0) a(\lambda'_2, x'_0)]_- \rangle e^{iEt}. \quad (14.19)$$

Спектральная функция в данном случае, очевидно, вещественна, и следовательно, справедливы равенства (14.16) и (14.16а) и дисперсионные соотношения, связывающие вещественную и мнимую части магнитной восприимчивости.

Обратимся теперь ко второму частному случаю — поведению системы в однородном электрическом поле напряженности $\mathcal{E} = \mathcal{E}_m e^{-i\omega x_0 - \varepsilon |x_0|}$. Гамильтониан (14.1) при этом имеет вид

$$\Delta H = -(\mathcal{E}_m, \mathbf{d}(x_0)) e^{-i\omega x_0 - \varepsilon |x_0|}, \quad (14.20)$$

где $\mathbf{d}$ — полный дипольный момент системы. Очевидно, он и играет роль оператора C_1 ; усредняемый же оператор C_2 есть плотность тока $\mathbf{j}$. Функция $\chi(\omega)$ в данном случае

представляет собой комплексный тензор электропроводности, который мы обозначим через $\sigma_{ii}(\omega)$. Равенство (14.16а) превращается при этом в хорошо известное дисперсионное соотношение Крамерса — Кронига [21] — [22], связывающее вещественную и мнимую части диэлектрической проницаемости ε . Действительно, тензоры электропроводности и диэлектрической проницаемости связаны хорошо известными равенствами

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} \sigma_{ij}(\omega) &= -\omega \operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega), \\ \operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega) &= \omega \operatorname{Im} \varepsilon_{ij}(\omega).\end{aligned}\quad (14.21)$$

Подставляя (14.21) в (14.16а), принимая во внимание (14.13) и замечая, что $\operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega) \rightarrow \delta_{ij}$ при $\omega \rightarrow \infty$, легко находим

$$\operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega) - \delta_{ij} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} \varepsilon_{ij}(E)}{E - \omega}. \quad (14.22)$$

Это есть соотношение Крамерса — Кронига, написанное в тензорной форме.

Формула (14.9) в данном случае принимает вид

$$\sigma_{ii}(\omega) = i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \theta(t) \langle [j_i(x_0), d_i(x'_0)]_- \rangle e^{i\omega t}. \quad (14.23)$$

Интегрируя по частям, получим

$$\begin{aligned}\sigma_{ii}(\omega) &= -\frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \left\{ \delta(t) \langle [j_i(x_0), d_i(x'_0)]_- \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \theta(t) \left\langle \left[j_i(x_0), \frac{\partial}{\partial x'_0} d_i(x'_0) \right]_- \right\rangle \right\}. \quad (14.24)\end{aligned}$$

В первом слагаемом коммутатор надо вычислять лишь при $x'_0 = x_0$. Мы ограничимся, как и в § 13, рассмотрением пространственно однородных систем. Имея в виду возможные применения в теории твердого тела, при этом уже нельзя писать оператор кинетической энергии в виде $T(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m_0$, и соответственно скорость $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}) \neq \mathbf{p}/m_0$ [см. замечания после формулы (13.24) в § 13]. Обозначая, как и в § 13, результат усреднения $\langle \rangle$ по выделенным направлениям

на поверхности $T(\mathbf{p}) = \text{const}$ через $\mathbf{p}f(\mathbf{p}^2)$, без труда получаем

$$\langle [j_i(x_0), d_i(x_0)]_- \rangle = -ine^2 \sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}) \{ \delta_{ii} f(\mathbf{p}^2) + 2p_i p_i f'(\mathbf{p}^2) \}. \quad (14.25)$$

Здесь штрих обозначает производную по всему аргументу, а $n(\mathbf{p})$ есть функция распределения, нормированная обычным образом. В соответствии со сказанным в начале этого параграфа $n(\mathbf{p})$ надлежит вычислять в отсутствие поля $\mathcal{E}$, т. е. в условиях равновесия. При этом $n(\mathbf{p}) = n(-\mathbf{p})$, и следовательно, правая часть (14.25) пропорциональна единичному тензору. Введем обозначение

$$\sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}) \left\{ f(\mathbf{p}^2) + \frac{2}{3} \mathbf{p}^2 f'(\mathbf{p}^2) \right\} = \frac{1}{\tilde{m}}. \quad (14.26)$$

Тогда

$$\langle [j_i(x_0), d_i(x_0)]_- \rangle = -\frac{ine^2}{\tilde{m}} \delta_{ii}. \quad (14.27)$$

Величину $\tilde{m}$ можно назвать средней эффективной массой. В частности, если $T(\mathbf{p})$ дается формулой (13.26), то $\tilde{m}$ превращается в эффективную массу m^* (13.27).

Обобщение формулы (14.27) на случай нескольких типов заряженных частиц, как и в § 13, не представляет труда и

сводится к замене множителя $\frac{ne^2}{\tilde{m}}$ на $\sum_a \frac{n_a e_a^2}{\tilde{m}_a}$, где индекс a

нумерует различные типы частиц, и суммирование производится по всем таким типам.

Далее,

$$\frac{\partial}{\partial x'_0} d_i(x'_0) = \int dx' j_i(x').$$

В результате мы получаем

$$\sigma_{ii}(\omega) = \frac{ine^2}{\tilde{m}\omega} \delta_{ii} + \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dt dx' e^{i\omega t} \theta(t) \langle [j_i(x), j_i(x')]_- \rangle. \quad (14.28)$$

Поскольку плотность тока есть аддитивный оператор, соотношение (14.10) немедленно позволяет выразить σ_{ii} через

двухчастичную функцию Грина (14.19). Можно воспользоваться формулой (14.18), полагая там $\lambda = \{x, s\}$ и заменяя матричные элементы магнитного момента на матричные элементы оператора плотности тока.

Иногда, однако, может оказаться более удобным рассматривать «токовое поле», отождествляя $j_i(x)$ и $j_i(x')$ с «первичными» операторами C_1 и C_2 в общих формулах § 4.

Тензор электропроводности при этом легко выразить через корреляционную функцию токов (13.15). Действительно, полагая

$$\langle [j_i(x), j_i(x')]_- \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} F_{ii}^{(-)}(x, x'; E) \quad (14.29)$$

и пользуясь формулой (2.10), мы получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{ii}(\omega) &= \frac{ine^2}{\tilde{m}\omega} \delta_{ii} + \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int dx' e^{i\omega t} \theta(t) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iEt} F_{ii}^{(-)}(x, x'; E) = \\ &= \frac{ine^2}{\tilde{m}\omega} \delta_{ii} - \frac{i}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \int dx' \frac{F_{ii}^{(-)}(x, x'; E)}{E - \omega - i\varepsilon} = \\ &= \frac{ine^2}{\tilde{m}\omega} \delta_{ii} - \frac{i}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\text{th} \frac{\beta E}{2}}{E - \omega - i\varepsilon} \int dx' F_{ii}^{(+)}(x, x'; E). \end{aligned} \quad (14.30)$$

В интересующем нас пространственно однородном случае функция $F_{ii}^{(+)}(x, x'; E)$ дается формулами (13.15) — (13.19); соответственно равенство (14.30) принимает вид

$$\begin{aligned} \sigma_{ii}(\omega) &= \frac{ine^2}{\tilde{m}\omega} \delta_{ii} - \frac{i}{\omega} (2\pi)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{P} \frac{\text{th} \frac{\beta E}{2}}{E - \omega} F_{ii}^{(+)}(0, E) + \\ &+ (2\pi)^3 \frac{\pi \text{th} \frac{\beta \omega}{2}}{\omega} F_{ii}^{(+)}(0, \omega). \end{aligned} \quad (14.31)$$

Как и следовало ожидать, ток в однородном поле (и в однородной среде) определяется лишь фурье-компонентами кор-

реляционной функции при $k=0$. Из формулы (13.19) следует, что в этих условиях функция $F_{II}^{(+)}$ переходит просто в F_1 : $F_{II}^{(+)}(0, E) = \delta_{II} F_1(0, E^2)$. Таким образом, тензор электропроводности сводится к скаляру σ (как и должно быть в среде с такой симметрией); вещественная часть его положительна [см. (13.20)]. Из (14.31) мы имеем

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) = (2\pi)^3 \frac{\pi \operatorname{th} \frac{\beta \omega}{2}}{\omega} F_1(0, \omega^2) = \operatorname{Re} \sigma(-\omega). \quad (14.32)$$

В частности, статическая электропроводность есть

$$\operatorname{Re} \sigma(0) = \frac{\pi \beta}{2} (2\pi)^3 F_1(0, 0). \quad (14.33)$$

Для мнимой части σ мы получаем

$$\operatorname{Im} \sigma(\omega) = \frac{ne^2}{\tilde{m}\omega} - \frac{(2\pi)^3}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \mathcal{P} \frac{F_1(0, E^2)}{E - \omega} \operatorname{th} \frac{\beta E}{2} = -\operatorname{Im} \sigma(-\omega). \quad (14.34)$$

Последнее равенство можно переписать также в виде

$$\operatorname{Im} \sigma(\omega) = \frac{ne^2}{\tilde{m}\omega} - (2\pi)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\operatorname{th} \frac{\beta E}{2}}{E} \mathcal{P} \frac{F_1(0, E^2)}{E - \omega}. \quad (14.34a)$$

Из формул (14.31) и (14.34) непосредственно вытекают некоторые утверждения общего характера.

Во-первых, в предельном случае очень больших частот вторым слагаемым в правой части (14.34) можно пренебречь. Тогда

$$\operatorname{Im} \sigma(\omega) = \frac{ne^2}{\tilde{m}\omega},$$

и следовательно,

$$\operatorname{Re} \epsilon(\omega) = 1 - \frac{ne^2}{\tilde{m}\omega^2}. \quad (14.35)$$

Таким образом, при больших частотах вещественная часть диэлектрической проницаемости стремится к значению, характерному для системы свободных зарядов, если под массой понимать величину $\tilde{m}$. Для заряженных частиц в пустоте (при наличии лишь равномерно распределенного в пространстве

компенсирующего заряда) это была бы истинная масса частицы m_0 . Однако в твердом теле это — величина более сложной природы. В частности, согласно (14.26) она может зависеть от температуры.

Во-вторых, составим интеграл от $\text{Re } \sigma(\omega)$ по всем частотам. Принимая во внимание четность функций $\sigma(\omega)$ и пользуясь тождеством (13.25), мы получаем

$$\int_0^{\infty} \text{Re } \sigma(\omega) d\omega = \frac{\pi n e^2}{2} f(0), \quad (14.36)$$

где $f(k)$ — функция, определенная в § 13.

Соотношение (14.36) носит название правила сумм. При наличии нескольких типов носителей тока в правой части его стояла бы сумма $\frac{\pi}{2} \sum_a n_a e_a^2 f_a(0)$, где индекс a нумерует различные типы частиц, и суммирование производится по всем таким типам.

Выражение (14.32) приобретает особенно наглядный вид в специальном случае, когда корреляционная функция токов затухает по простому экспоненциальному закону

$$\langle [j_l(x), j_l(x')]_+ \rangle = \langle [j_l(x, 0), j_l(x', 0)]_+ \rangle e^{-\frac{|x_0 - x'_0|}{\tau}}, \quad (14.37)$$

где τ — некоторая постоянная. Очевидно, соответствующая спектральная функция имеет вид $C/(1 + E^2 \tau^2)$, где C — величина, не зависящая от E . Таким образом, аппроксимация (14.37) означает предположение о чисто мнимых полюсах спектральной функции. Для вещественной части тензора электропроводности мы получаем при этом

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma(\omega) &= \\ &= 2\pi \frac{\text{th } \frac{\beta\omega}{2}}{\omega} \int d(x - x') \langle [j_l(x, 0), j_l(x', 0)]_+ \rangle \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2}. \end{aligned} \quad (14.38)$$

Величину τ в этом случае можно интерпретировать как время свободного пробега. В пренебрежении квантовыми поправками $\left(\frac{\text{th } \beta\omega/2}{\omega} \rightarrow \beta/2 \right)$ частотная зависимость (14.38) принимает вид,

хорошо известный из обычной кинетической теории. Подчеркнем, однако, что возможность представить корреляционную функцию в простом виде (14.37) заранее не очевидна.

§ 15. Реакция системы на внешние воздействия. Представление через вершинную часть¹⁾

Для применения формул предыдущего параграфа к конкретным задачам требуется предварительно вычислить двухчастичную (или еще более сложную) функцию Грина. Это, как правило, сводится к решению уравнений типа кинетического, т. е. к довольно сложной задаче. По этой причине весьма желательно получить и другие представления для кинетических коэффициентов, в которые входили бы функции иного типа. Одна такая возможность будет рассмотрена в настоящем параграфе. Конечно, и здесь мы можем ожидать получения лишь формально замкнутых выражений, содержащих величины, фактически неизвестные. В некоторых случаях может оказаться более удобным вычислять именно эти величины, а не двухчастичные функции Грина.

Для конкретности мы рассмотрим тензор электропроводности в условиях применимости закона Ома; из вывода, однако, будет ясно, что развиваемый метод в равной мере пригоден для вычисления любых кинетических коэффициентов.

Оператор плотности тока проводимости во внешнем поле с 4-потенциалом $\tilde{A}_\alpha = \{\tilde{A}_0, \tilde{A}\}$ имеет вид

$$j_i(x) = \frac{ie}{2m} \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_i} \psi - \bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) - \frac{e^2}{2mc_0} \tilde{A}_i(x) \bar{\psi}(x) \psi(x). \quad (15.1)$$

Следовательно, для средней плотности тока мы получаем

$$\tilde{j}_i(x) = \tilde{j}_i^{(1)}(x) + \tilde{j}_i^{(2)}(x), \quad (15.2)$$

где в согласии с (5.2)

$$\tilde{j}_i^{(1)}(x) = \frac{e}{2m} \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x'_0 > x_0}} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x'_i} \right) \text{Sp } G_c(x, x'; A), \quad (15.3)$$

$$\tilde{j}_i^{(2)}(x) = -\frac{ie^2}{2mc_0} \tilde{A}_i(x) \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x'_0 > x_0}} \text{Sp } G_c(x, x'; A). \quad (15.4)$$

¹⁾ См. [23].

Здесь $G_c(x, x'; A)$ есть одночастичная причинная функция Грина, вычисленная как с учетом внешнего электромагнитного поля (на что указывает функциональный аргумент A), так и с учетом взаимодействий, обуславливающих затухание. Интересуясь лишь линейными по внешнему полю эффектами и принимая во внимание определение вершинной части (9.4а), мы имеем

$$\begin{aligned} G_c(x, x'; A) &= G_c(x, x') + e \int dy \frac{\delta G_c(x, x'; A)}{\delta e \tilde{A}_\alpha(y)} \tilde{A}_\alpha(y) = \\ &= G_c(x, x') + \\ &+ e \int dy dy' dy'' G_c(x, y') \Gamma_e^\alpha(y', y''; y) G_c(y'', x') \tilde{A}_\alpha(y), \end{aligned} \quad (15.5)$$

где

$$\Gamma_e^\alpha(y', y''; y) = - \frac{\delta G_c^{-1}(y', y'')}{\delta e \tilde{A}_\alpha(y)} \quad (15.6)$$

— «электромагнитная» вершинная часть, а $G_c(x, x')$ — функция Грина для системы без электромагнитного поля. Вообще говоря, пределы интегрирования в (15.5) следует выбирать с учетом условия причинности. Дабы избежать связанных с этим вычислительных осложнений, мы будем рассматривать лишь предельный случай $x_0 \rightarrow \infty$. В дальнейшем это обстоятельство явно не оговаривается, но подразумевается.

Как правило, в отсутствие внешнего поля средний ток в системе равен нулю¹⁾. Поэтому первое слагаемое в правой части (15.5) не дает вклада в $\tilde{j}_i^{(1)}(x)$. С другой стороны, в линейной аппроксимации только его и надо подставлять в формулу для $\tilde{j}_i^{(2)}$. Таким образом, комбинируя формулы (15.2) — (15.5), мы получаем

$$\tilde{j}_i(x) = \int \lambda_i^\alpha(x, y) \tilde{A}_\alpha(y) dy, \quad (15.7)$$

¹⁾ Исключение составляют сверхпроводники. Однако во всех без исключения случаях тензор электропроводности определяется только частью тока, обращаемой в нуль вместе с полем; поэтому последующие формулы применимы всегда.

где

$$\begin{aligned} \lambda_i^a(x, y) = & \frac{e^2}{2m} \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x'_0 > x_0}} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x'_i} \right) \text{Sp} \int dy' dy'' G_c(x, y') \times \\ & \times \Gamma_e^a(y', y''; y) G_c(y'', x') - \\ & - \frac{ie^2}{2mc_0} \lim_{\substack{x' \rightarrow x \\ x'_0 > x_0}} \text{Sp} G_c(x, x') \delta(x - y) \delta_{ia}. \end{aligned} \quad (15.8)$$

Сопоставим (15.8) и (9.13). Поскольку в нерелятивистском приближении $\gamma_i \rightarrow v_i/c$, видно, что правая часть (15.8) сводится просто к $\mathcal{F}_i^a$.

Совокупность величин λ_i^a связана с тензором электропроводности σ_i^j . Действительно, по определению

$$j_i(x) = \int \sigma_i^j(x, y) \mathcal{E}_j(y) dy, \quad (15.9)$$

где $\mathcal{E}_j(y)$ — напряженность внешнего электрического поля, связанная с 4-потенциалом равенством

$$\mathcal{E}_j(y) = \frac{\partial \tilde{A}_0(y)}{\partial y_i} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial \tilde{A}_j(y)}{\partial y_0}. \quad (15.10)$$

На основании (15.7), (15.9) и (15.10) мы имеем

$$\lambda_i^j(x, y) = \frac{1}{c_0} \frac{\partial \sigma_i^j(x, y)}{\partial y_0}, \quad \lambda_i^0(x, y) = - \frac{\partial \sigma_i^j(x, y)}{\partial y_j}. \quad (15.11)$$

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением систем, пространственно однородных в отсутствие внешнего поля, а потенциал $\tilde{A}_\alpha(y)$ возьмем в виде¹⁾

$$\tilde{A}_\alpha(y) = \tilde{A}_\alpha(k) e^{-iky}. \quad (15.12)$$

¹⁾ Чтобы учесть условие адиабатического включения и выключения взаимодействия при $y_0 \rightarrow \pm \infty$, достаточно было бы ввести фиктивное затухание, придавая k_0 бесконечно малую мнимую часть соответствующего знака. Фактически это не требуется, ибо в системах с конечной электропроводностью всегда имеет место и реальное затухание.

Очевидно, в такой же форме можно будет представить и плотность тока

$$\tilde{j}_i(x) = \tilde{j}_i(k) e^{-ikx}, \quad (15.13)$$

и формулы (15.7), (15.8) и (15.11) примут вид

$$\tilde{j}_i(k) = \lambda_i^a(k) \tilde{A}_a(k), \quad (15.14)$$

$$\begin{aligned} \lambda_i^a(k) = & \frac{ie^2}{m} (2\pi)^4 \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 e^{ip_0 t} \times \\ & \times \text{Sp} \int d\mathbf{p} p_i G_c \left(p + \frac{k}{2} \right) \Gamma_e^a \left(p + \frac{k}{2}, p - \frac{k}{2} \right) G_c \left(p - \frac{k}{2} \right) - \\ & - \frac{ie^2}{2mc_0} \lim_{t \rightarrow +0} \text{Sp} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 e^{ip_0 t} \int d\mathbf{p} G_c(p), \end{aligned} \quad (15.15)$$

$$\begin{aligned} i\sigma_i^j k_j &= \lambda_i^0, \\ i\sigma_i^j k_0 &= c_0 \lambda_i^j. \end{aligned} \quad (15.16)$$

Здесь фурье-образ вершинной части определяется равенством

$$\Gamma_e^a(y', y''; y) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dq' dq'' e^{-i(q', y' - y) + i(q'', y'' - y)} \Gamma_e^a(q', q'').$$

Формулы (15.15), (15.16) определяют тензор электропроводности с полным учетом как временной, так и пространственной дисперсии. Пользуясь ими, следует иметь в виду одно важное обстоятельство. Именно, выражая в формуле (15.5) функциональную производную $\frac{\delta G_c}{\delta e \tilde{A}_a}$ через вершинную часть,

мы должны были произвести умножение на G_c . Последняя операция, однако, вообще говоря, сингулярна, соответственно чему получающиеся формулы могут оказаться неоднозначными. Для устранения неоднозначности надо принять во внимание общие свойства тензора электропроводности как функции комплексной переменной k_0 . Как мы знаем (см. предыдущий параграф), эта функция аналитична в верхней полуплоскости. Следовательно, в сомнительных случаях мы должны

рассматривать k_0 как комплексную переменную с положительной мнимой частью $\text{Im } k_0 = \gamma > 0$ и лишь в конечном результате совершать предельный переход $\gamma \rightarrow 0$ (то же самое получается, естественно, и при учете адиабатического включения взаимодействия при $y_0 \rightarrow -\infty$).

Рассмотрим, в частности, систему заряженных частиц во внешнем поле, достаточно медленно меняющемся как во времени, так и в пространстве. Первое условие позволяет положить векторный потенциал равным нулю (формально можно совершить предельный переход $c_0 \rightarrow \infty$), благодаря чему выпадает последнее слагаемое в правой части (15.15); в силу второго условия можно оставить в (15.15) лишь низшие члены по k . Тогда легко находим

$$\sigma_i^j(k_0) = \frac{e^2}{m} (2\pi)^4 \text{Sp} \frac{\partial}{\partial k_j} \int d\mathbf{p} p_i \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} d p_0 e^{i p_0 t} \times \\ \times G_c \left(p + \frac{k}{2} \right) \Gamma_e^0 \left(p + \frac{k}{2}, p - \frac{k}{2} \right) G_c \left(p - \frac{k}{2} \right) \Big|_{k=0}. \quad (15.17)$$

Заметим, что величина m в (15.1) и, следовательно, в (15.17), есть по определению истинная масса заряженной частицы. Желая использовать полученные выше соотношения в теории твердого тела и ограничиться вместе с тем рассмотрением лишь пространственно однородных систем, надлежит (как и в предыдущих параграфах) произвести замену

$$\frac{p_i}{m} \rightarrow v_i(\mathbf{p}) = \frac{\partial W(\mathbf{p})}{\partial p_i}, \quad (15.18)$$

где $W(\mathbf{p})$ — энергия электрона как функция его квазиимпульса $\mathbf{p}$.

Для иллюстрации рассмотрим случай свободного электронного газа. Тогда для функции G_c мы имеем (см. (5.20))

$$G_c(\mathbf{p}) = - \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{p_0 - W(\mathbf{p}) + i\eta [2n_F(\mathbf{p}) - 1]}{[p_0 - W(\mathbf{p})]^2 + \eta^2}, \quad \eta \rightarrow +0,$$

$$W(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}, \quad \Gamma_e^0 = 1.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \text{Sp} \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 e^{ip_0 t} G_c \left(p + \frac{k}{2} \right) G_c \left(p - \frac{k}{2} \right) = \\ = \frac{2i}{(2\pi)^7} \left\{ \frac{n_F(p + k/2)}{-k_0 + W(p + \frac{k}{2}) - W(p - \frac{k}{2})} + \right. \\ \left. + \frac{n_F(p - k/2)}{k_0 - W(p + \frac{k}{2}) + W(p - \frac{k}{2})} \right\}. \quad (15.19) \end{aligned}$$

В соответствии с замечанием на стр. 148, интеграл от (15.19) по p следует вычислять, рассматривая k_0 как комплексную переменную

$$k_0 = \omega + i\gamma, \quad \gamma > 0. \quad (15.20)$$

Производя разложение по степеням k , мы получаем на основании (15.19) и (15.17)

$$\text{Re } \sigma_i^j(\omega) = -\frac{e^2}{m^2} \cdot \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot \delta_{ij} \int dp p^2 \frac{\partial n_F(p)}{\partial W(p)} \frac{\gamma}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (15.21)$$

$$\text{Im } \sigma_i^j(\omega) = -\frac{e^2}{m} \frac{2}{(2\pi)^3} \int dp p_i v_j \frac{\partial n_F(p)}{\partial W(p)} \frac{\omega}{\omega^2 + \gamma^2}. \quad (15.22)$$

Правая часть (15.21) по форме точно совпадает с результатом решения кинетического уравнения, если под γ подразумевать время релаксации. Этому обстоятельству, однако, не следует придавать слишком большого значения: в нашем случае γ есть просто мнимая часть комплексного аргумента k_0 . Согласно условию адиабатического включения взаимодействия ее следует считать бесконечно малой, и тогда статическая проводимость ($\text{Re } \sigma_i^j(\omega)$ при $\omega = 0$), конечно, расходится, как это и должно быть в системе без затухания. Формулы (15.21), (15.22) нельзя непосредственно перенести на случай системы с затуханием, ибо тогда функция Грина не имеет простого вида (5.20). Формула (15.22) после интегрирования по частям дает

$$\text{Im } \sigma_i^j(\omega) = \frac{ne^2}{m\omega} \delta_{ij}, \quad (15.23)$$

где

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int dp n_F(p)$$

есть полная концентрация электронов. В соответствии с (14.21) формула (15.23) приводит к хорошо известному выражению для диэлектрической проницаемости свободного электронного газа

$$\varepsilon = 1 - \frac{ne^2}{m\omega^2} \quad (15.24)$$

(напомним, что заряд у нас выражен в системе Хивисайда).

Возвратимся теперь к общей формуле (15.17). Как уже отмечалось в начале этого параграфа, фигурирующие в ней функции G_c и Γ_e^0 относятся к равновесной системе, и в кинетических задачах их формально можно считать известными. Фактически функцию Грина надлежит определять из уравнений §§ 9, 10; с другой стороны, замкнутое уравнение для вершинной части, как мы сейчас покажем, можно сформулировать только приближенно. Будем рассматривать систему заряженных частиц, взаимодействующих с медленно меняющимся классическим электромагнитным внешним полем и, кроме того, с неким квантовым бозевским полем, характеризуемым «потенциалом» $\Phi(x)$ и константой связи g (именно это последнее взаимодействие и обуславливает процессы релаксации, приводящие к конечной электропроводности). Причинную функцию Грина для этого поля, как и раньше, обозначим через D_c , массовый оператор, описывающий взаимодействие электронов с ним, — через M , вершинную часть — через Γ (в отличие от «электромагнитной» вершинной части Γ_e). Задача о движении электронов в поле Φ считается решенной, т. е. функции D_c и Γ известны. Уравнение движения для $G_c(x, x')$ в данном случае имеет вид (ср. (9.7))

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) + g\tilde{\Phi}(x) + e\tilde{A}_0 \right\} G_c(x, x') - \\ - \int dy M(x, y) G_c(y, x') = -\delta(x - x'). \quad (15.25)$$

Отсюда по определению (15.6)

$$\Gamma_e^0(y', y''; y) = \delta(y' - y'') \delta(y' - y) + \\ + g \frac{\delta\tilde{\Phi}(y')}{\delta e\tilde{A}_0(y)} \delta(y' - y'') - \frac{\delta M(y', y'')}{\delta e\tilde{A}_0(y)}. \quad (15.26)$$

Для вычисления функциональных производных удобно воспользоваться символической записью. Средний потенциал $\tilde{\Phi}$ дается равенством (10.3а)

$$\tilde{\Phi} = -D_c'^{(0)}(J + igf\Gamma^{(0)}G_c).$$

Варьируя это выражение по $\tilde{A}_0$, получаем

$$\frac{\delta \tilde{\Phi}}{\delta e \tilde{A}_0} = -igD_c'^{(0)}f\Gamma^{(0)}G_c\Gamma_e^0G_c. \quad (15.27)$$

В пространственно однородном случае $D_c' = D_c$. Далее, согласно (9.5)

$$M = -ig^2\Gamma^{(0)}G_c\Gamma D_c,$$

и, следовательно,

$$\frac{\delta M}{\delta e \tilde{A}_0} = -ig^2\Gamma^{(0)}\left\{G_c\Gamma_e^0G_c\Gamma D_c - G_c\frac{\delta \Gamma}{\delta e \tilde{A}_0}D_c - G_c\Gamma\frac{\delta D_c}{\delta e \tilde{A}_0}\right\}. \quad (15.28)$$

По определению вершинной части (9.4)

$$-\frac{\delta \Gamma}{\delta e \tilde{A}_0} = \frac{\delta \Gamma_e^0}{\delta g \tilde{\Phi}}. \quad (15.29)$$

Для вычисления функциональной производной от D_c запишем ее в виде

$$\frac{\delta D_c}{\delta e \tilde{A}_0} = -D_c\frac{\delta D_c^{-1}}{\delta e \tilde{A}_0}D_c \quad (15.30)$$

и воспользуемся уравнением (10.26)

$$D_c^{-1} = [D_c^{(0)}]^{-1} - \mathcal{P},$$

причем, как мы знаем,

$$\mathcal{P} = -ig^2\Gamma^{(0)}G_c\Gamma G_c.$$

Таким образом,

$$\frac{\delta D_c}{\delta e \tilde{A}_0} = -ig^2D_c\Gamma^{(0)}G_c\left\{\Gamma_e^0G_c\Gamma + \frac{\delta \Gamma}{\delta e \tilde{A}_0} + \Gamma G_c\Gamma_e^0\right\}G_cD_c. \quad (15.31)$$

Собирая формулы (15.26) — (15.31), получаем

$$\Gamma_e^0 = 1 - ig^2 D_c^{(0)} f \Gamma^{(0)} G_c \Gamma_e^0 G_c + ig^2 \Gamma^{(0)} \left\{ G_c \Gamma_e^0 G_c \Gamma D_c + G_c \frac{\delta \Gamma_e^0}{\delta g \Phi} D_c + \right. \\ \left. + ig^2 G_c \Gamma D_c \Gamma^{(0)} G_c \left[\Gamma_e^{(0)} G_c \Gamma - \frac{\delta \Gamma_e^0}{\delta g \Phi} + \Gamma G_c \Gamma_e^0 \right] G_c D_c \right\}. \quad (15.32)$$

Все величины в правой части (15.32) должны вычисляться для системы без внешнего электромагнитного поля. Наличие функциональных производных от Γ_e^0 означает, что фактически мы имеем здесь дело с бесконечной системой уравнений. Оборвать ее можно лишь с помощью какого-либо приближенного приема. В частности, если взаимодействие заряженных частиц с квантовым полем Φ достаточно мало, можно оставить лишь члены низшего порядка по g^2 . Таким путем находим замкнутое линейное интегральное уравнение для Γ_e^0 (мы выписываем его в импульсном представлении):

$$\Gamma_e^0 \left(p + \frac{k}{2}, p - \frac{k}{2} \right) = 1 - ig^2 (2\pi)^8 D_c^{(0)}(k) \int dk' G_c \left(k' + \frac{k}{2} \right) \times \\ \times \Gamma_e^0 \left(k' + \frac{k}{2}, k' - \frac{k}{2} \right) G_c \left(k' - \frac{k}{2} \right) + \\ + ig^2 (2\pi)^8 \int dk' D_c(k') G_c \left(k' + p + \frac{k}{2} \right) \times \\ \times \Gamma_e^0 \left(k' + p + \frac{k}{2}, k' + p - \frac{k}{2} \right) G_c \left(k' + p - \frac{k}{2} \right). \quad (15.33)$$

Решение этого уравнения в конечном виде удастся получить лишь в некоторых частных случаях.

§ 16. Квазичастицы

Формулы, полученные в трех предыдущих параграфах, несмотря на внешнюю простоту, отнюдь еще не являются окончательными: для фактического их применения требуется предварительное вычисление тех или иных функций Грина, что, как уже указывалось, обычно удается сделать только приближенно. Весьма характерной для излагаемой методики, однако, является возможность делать ряд качественных выводов общего характера, справедливых независимо от каких-либо аппроксимаций. В настоящем параграфе мы применим

полученные ранее соотношения для исследования общего вопроса об элементарных возбуждениях системы многих тел. Представление об элементарных возбуждениях («квазичастицах») занимает одно из центральных мест в современной физике конденсированной среды. Неоднократно высказывалось общее утверждение (см., например, [24]), что слабо возбужденные состояния любой квантовой системы взаимодействующих частиц можно представить как состояния идеального (или почти идеального) газа тех или иных элементарных возбуждений («квазичастиц»). Поскольку последний имитирует поведение системы свободных частиц, таким путем сразу получается, например, объяснение успехов так называемой «одноэлектронной» теории твердого тела (подробнее см. [25], [26]). Постулируя существование того или иного спектра квазичастиц, удалось успешно объяснить целый ряд явлений самой различной природы. В тех случаях, когда оказывалось возможным получить приближенное решение динамической задачи о той или иной системе многих тел, гипотеза элементарных возбуждений действительно получала подтверждение. Общее обоснование ее, однако, до сих пор не было дано, равно как и не были точно известны пределы ее применимости. Метод функций Грина позволяет внести известную ясность в этот вопрос.

Прежде всего, как уже отмечалось выше, сам факт существования «квазиодночастичного» спектра возбужденных состояний непосредственно вытекает из общих спектральных теорем §§ 3—5, устанавливающих связь энергетического спектра системы с особыми точками одно- и двухчастичных функций Грина [см. замечания к (5.1), (5.25), (9.18), (9.19)]. В этом смысле представление об элементарных возбуждениях обосновывается точно, без всяких аппроксимаций. Следует, однако, иметь в виду, что одного лишь «квазиодночастичного» характера спектра еще недостаточно для полного обоснования гипотезы элементарных возбуждений в том виде, в каком она обычно употребляется. Надо еще показать, что термодинамические величины, связанные с данной ветвью энергетического спектра, можно вычислять по формулам теории идеального газа. В §§ 9 и 12 мы видели, что в условиях применимости билинейных разложений типа (9.26) это действительно имеет место [см. равенства (9.31), (9.33) и (12.38)].

Так, средняя энергия системы взаимодействующих частиц представляется в виде суммы средних энергий идеальных газов квазичастиц, уровни энергии которых определяются собственными значениями эффективных волновых уравнений для функций $G_c(x, x'; E)$ и $G_{2,c}(x, x'; E)$; величины $Z'(E, v)$ и $Z'_2(E', v')$ при этом играют роль плотностей состояний, отнесенных к единице объема и соответственно к интервалам $dE dv$ и $dE' dv'$. Существенно, что хотя бы один из этих газов (второе слагаемое в формуле (12.38)) — всегда бозевский, даже в системе ферми-частиц.

Это означает, что в системе ферми-частиц сами собой выделяются минимум две ветви спектра возбуждений: фермиевская¹⁾ и бозевская. Возможно, конечно, и наличие нескольких фермиевских, равно как и нескольких бозевских ветвей. Так обстоит дело, если собственные значения соответствующих эффективных волновых уравнений образуют несколько различных групп (возможно — перекрывающихся).

В связи со сказанным сделаем следующие замечания.

Во-первых, билинейные разложения типа (9.26) не есть точные соотношения. Как указывалось в § 9, они справедливы лишь в пренебрежении мнимыми частями собственных значений уравнений типа (9.18), т. е. в пренебрежении затуханием соответствующих возбуждений. Иначе говоря, идея об описании возбужденных состояний системы в терминах газа квазичастиц справедлива лишь постольку, поскольку квазистационарные состояния этого газа можно рассматривать просто как стационарные. В этом смысле представление об элементарных возбуждениях является приближенным; им можно пользоваться лишь до тех пор, пока «ширина линии» мала по сравнению с удельной — отнесенной к одной частице — энергией возбуждения.

Во-вторых, как уже отмечалось в § 9, выражения (9.31), (9.33) позволяют вычислять по формулам теории идеального газа термодинамические величины только аддитивного типа. Для вычисления средних значений бинарных (и еще более сложных) операторов необходимо знать высшие статистические операторы — ρ_2 и т. д., связанные с функциями Грина соответствующих порядков. Как мы видели, последние также

¹⁾ Возбуждения фермиевской ветви, несущие электрический заряд, обычно называются носителями тока.

можно при определенных условиях представить в виде разложений типа (9.26); однако фигурирующие там собственные функции и собственные значения, вообще говоря, отличны от величин, входящих в выражение для G_c . Это означает, что термодинамическим величинам различных типов (аддитивным, бинарным и т. д.) могут соответствовать различные газы квазичастиц. Следует также иметь в виду, что условия применимости билинейных разложений для разных функций Грина определяются разными параметрами малости.

В-третьих, даже в условиях применимости формулы (9.26) величины, именуемые энергиями квазичастиц, отнюдь не являются чисто механическими: как уже неоднократно отмечалось, они, вообще говоря, зависят от температуры. Иначе говоря, характеристики спектра квазичастиц суть величины термодинамические. Это обстоятельство влечет за собой ряд следствий, которые, однако, пока еще весьма мало исследованы.

ГЛАВА IV

ПЛАЗМЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

§ 17. Постановка задачи

Одним из важнейших объектов применения методики, развитой в предыдущих главах, является многоэлектронная теория твердого тела. Речь идет здесь прежде всего о последовательном учете кулоновского взаимодействия между электронами.

В ряде случаев это не обязательно делать в явной форме — достаточно просто постулировать существование некоторого спектра элементарных возбуждений¹⁾; однако есть целый класс важных задач, в которых явное динамическое рассмотрение многоэлектронной системы, по-видимому, неизбежно. К числу таких задач относится прежде всего сама проблема обоснования метода элементарных возбуждений. Как мы видели в § 16, методом функций Грина она решается в общем виде.

Для выявления всех возможных в данной системе типов элементарных возбуждений требуется, однако, явное решение уравнений Швингера для данного конкретного случая. В частности, так обстоит дело в теории плазменных колебаний, для изучения которых аппарат функций Грина является, по-видимому, наиболее естественным. В твердом теле могут оказаться существенными квантовые поправки, что делает несколько рискованным применение стандартной методики кинетического уравнения Больцмана.

Далее, динамический подход необходим при изучении влияния различного рода структурных дефектов на

¹⁾ Так, например, обстоит дело в теории гальваномагнитных явлений в металлах (см., в частности, [1]).

можно при определенных условиях представить в виде разложений типа (9.26); однако фигурирующие там собственные функции и собственные значения, вообще говоря, отличны от величин, входящих в выражение для G_c . Это означает, что термодинамическим величинам различных типов (аддитивным, бинарным и т. д.) могут соответствовать различные газы квазичастиц. Следует также иметь в виду, что условия применимости билинейных разложений для разных функций Грина определяются разными параметрами малости.

В-третьих, даже в условиях применимости формулы (9.26) величины, именуемые энергиями квазичастиц, отнюдь не являются чисто механическими: как уже неоднократно отмечалось, они, вообще говоря, зависят от температуры. Иначе говоря, характеристики спектра квазичастиц суть величины термодинамические. Это обстоятельство влечет за собой ряд следствий, которые, однако, пока еще весьма мало исследованы.

ГЛАВА IV

ПЛАЗМЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

§ 17. Постановка задачи

Одним из важнейших объектов применения методики, развитой в предыдущих главах, является многоэлектронная теория твердого тела. Речь идет здесь прежде всего о последовательном учете кулоновского взаимодействия между электронами.

В ряде случаев это не обязательно делать в явной форме — достаточно просто постулировать существование некоторого спектра элементарных возбуждений¹⁾; однако есть целый класс важных задач, в которых явное динамическое рассмотрение многоэлектронной системы, по-видимому, неизбежно. К числу таких задач относится прежде всего сама проблема обоснования метода элементарных возбуждений. Как мы видели в § 16, методом функций Грина она решается в общем виде.

Для выявления всех возможных в данной системе типов элементарных возбуждений требуется, однако, явное решение уравнений Швингера для данного конкретного случая. В частности, так обстоит дело в теории плазменных колебаний, для изучения которых аппарат функций Грина является, по-видимому, наиболее естественным. В твердом теле могут оказаться существенными квантовые поправки, что делает несколько рискованным применение стандартной методики кинетического уравнения Больцмана.

Далее, динамический подход необходим при изучении влияния различного рода структурных дефектов на

¹⁾ Так, например, обстоит дело в теории гальваномагнитных явлений в металлах (см., в частности, [1]).

энергетический спектр электронов в полупроводниках и металлах. Наконец, он, по-видимому, обязателен в задачах об обмене энергией между носителями тока и их окружением в кристалле. Важнейший пример задач этого типа составляет теория рекомбинации носителей тока в полупроводниках.

Следует подчеркнуть, что полностью микроскопический подход к исследованию энергетического спектра электронов в твердом теле связан с чрезвычайными математическими трудностями общего характера, не специфичными именно для многоэлектронной задачи. Эти трудности возникают и в обычной «одноэлектронной» теории и связаны с необходимостью решения задачи о движении одного электрона в периодическом поле идеальной решетки. Дело в том, что обычно в коллектив электронов, определяющих электрические, магнитные и др. свойства твердого тела, естественно включать электроны не всех вообще, а лишь одной-двух внешних атомных оболочек. Конкретное разделение на «коллектив электронов» и «атомные остовы» зависит, естественно, от природы вещества и характера задачи (см. ниже). Однако вид электронной плотности даже в изолированном атоме обычно не удается представить в простой аналитической форме. В результате приходится либо апеллировать к более или менее грубым приближенным методам, либо иметь дело с уравнением неизвестного вида. По этой причине представляется целесообразным вообще отказаться от полного вычисления энергетического спектра электронов в идеальной решетке, определяя его параметры из опыта. В полупроводниках для этой цели удобно использовать, например, явление циклотронного (диамагнитного) резонанса [2], [3]; в металлах успех сулит использование гальваномагнитных данных [1] и исследование поглощения ультразвука в магнитном поле [4]. Динамическая теория при этом должна давать ответ на следующие вопросы:

а) как меняется в результате взаимодействия энергетический спектр «свободных» частиц?

б) какие новые (по сравнению с идеальным газом) ветви спектра возникают в результате взаимодействия?

в) как меняется энергия системы при изменении числа электронов в ней?

Первый из поставленных вопросов связан с исследованием фермиевской ветви спектра (в частности, сюда относится и

проблема обоснования так называемой «одноэлектронной» теории), второй — с возникновением возбуждений типа Бозе (экситонов, плазменных квантов и т. д.), к третьему (в сочетании с первым) сводится задача о влиянии структурных дефектов на электронный спектр твердого тела. При этом под структурным дефектом совершенно не обязательно понимать нечто, находящееся внутри решетки, — роль «дефектов» могут играть и атомы (или молекулы), адсорбированные на поверхности кристалла. Таким образом, например, проблема хемосорбции на металлах оказывается в пределах компетенции электронной теории.

В связи с данной постановкой задачи следует сделать два замечания.

Во-первых, ясно, что полуэмпирический подход (определение спектра электронов в идеальной решетке из опыта) может быть успешен лишь, если фактически из опыта требуется определить только небольшое число параметров. (Именно так ставится задача, например, в методе эффективной массы [5] — [9].) Заранее очевидно, что такую программу можно эффективно провести лишь для состояний, описываемых достаточно «гладкими» волновыми функциями (длинноволновая часть спектра бозевских возбуждений, неглубокие локальные уровни): только в этих условиях периодический потенциал «смазывается», и тонкие детали его не играют роли. С другой стороны, в задачах, где существенную роль играют волновые числа, сравнимые с постоянной обратной решетки, использование полуэмпирического метода может дать результаты, представляющие лишь умозрительный интерес. В частности, такой подход вряд ли имеет смысл при вычислении энергии основного состояния многоэлектронной системы в металле (если не говорить о чисто методической стороне дела).

Во-вторых, первая из поставленных задач представляет интерес для полупроводника, но не для металла. Действительно, в полупроводнике концентрация свободных электронов (и, следовательно, средняя энергия взаимодействия между ними) может в зависимости от условий опыта меняться в чрезвычайно широких пределах (при неизменной химической природе вещества). Поэтому задача о вычислении параметров энергетического спектра в зависимости от концентрации свободных носителей тока в образце имеет вполне

реальный смысл. Равным образом вполне осмысленным является здесь и представление о системе практически невзаимодействующих электронов проводимости, ибо при понижении температуры концентрация их может быть сделана весьма малой (параметры именно такой системы определяются в опытах по диамагнитному резонансу в микроволновой области). С другой стороны, в металле концентрация электронов практически всегда фиксирована, а средняя энергия взаимодействия между электронами отнюдь не мала по сравнению со средней кинетической. Поэтому представление о спектре «свободных частиц» здесь лишено физического содержания.

Ряд результатов, связанных с исследованием энергетического спектра электронов в металлах и в полупроводниках (в частности, с исследованием плазменной ветви спектра), был получен в последние годы с помощью так называемого метода «дополнительных переменных» [10]—[17]. Однако, в отличие от случая статистики Бозе [18], в применении к ферми-системам этот метод встречается с известными — именно для него специфическими — трудностями. Во-первых, дополнительное условие, появляющееся в связи с введением лишних переменных, осложняет исследование кинетических процессов с участием плазменных квантов. Во-вторых, связь бозе- и ферми-возбуждений, предполагаемая малой в работах [12] и [16], [17], фактически, по-видимому, таковой не является. Наконец, в третьих, логически не вполне удовлетворительным представляется искусственное введение предельного импульса плазменного кванта k_c . Ограничение возможных значений волнового вектора плазмона должно было бы не навязываться, а получаться само собой. В следующих параграфах мы увидим, что при решении задачи методом функций Грина «естественные границы» плазменного спектра действительно определяются из самой теории.

§ 18. Частоты и затухание плазменных колебаний¹⁾

Рассмотрим нерелятивистскую систему заряженных частиц одного знака (в дальнейшем именуемых для краткости просто электронами) с чисто электростатическим взаимодействием

¹⁾ См. [20], [21].

в отсутствие магнитного поля. Будем считать систему в целом нейтральной благодаря наличию (не обязательно равномерно размазанного) классического компенсирующего заряда. Именно такая ситуация типична как для металла (свободные электроны и ионы решетки), так и для полупроводника (свободные электроны или дырки и заряженные примесные центры). Рассматривая электростатическое взаимодействие частиц как взаимодействие через поле, можно непосредственно воспользоваться уравнениями (10.1), (10.2) и (9.5а), (9.13); следует лишь специализировать фигурирующие в них величины $G_c^{(0)}$ и $D_c^{(0)}$ в соответствии с конкретной природой данной физической системы. Ограничимся неферромагнитными веществами. Будем считать также, что валентные электроны достаточно отделены (энергетически) от всех остальных, чтобы можно было рассматривать атомные остовы просто как источники поля¹⁾. В качестве невозмущенной задачи, решение которой считается известным, естественно выбрать «одноэлектронную» задачу в данной идеальной кристаллической решетке. Под словом «одноэлектронная» понимается задача об одном электроне в периодическом поле атомных остовов, нейтрализованных равномерно распределенным зарядом всех остальных электронов. Предположим, что соответствующие собственные значения энергии не зависят от спина²⁾, и обозначим их через $W(\lambda)$, а принадлежащие им собственные функции — через $\varphi_\lambda(x)$ (λ — совокупность всех квантовых чисел кроме спинового). Тогда в соответствии с (5.14) невозмущенная фермиевская функция Грина принимает вид

$$G_{c,ss'}^{(0)}(x, x') = -\frac{1}{2\pi} \Delta(s-s') \int d\lambda \varphi_\lambda(x) \bar{\varphi}_\lambda(x') \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(x_0-x'_0)} \frac{\omega - W(\lambda) + i\varepsilon [2n^{(0)}(\lambda) - 1]}{[\omega - W(\lambda)]^2 + \varepsilon^2}. \quad (18.1)$$

¹⁾ Ср., однако, ниже замечание б) на стр. 191.

²⁾ Тем самым из рассмотрения исключаются не только ферромагнетики, но и вещества, в которых заметную роль играет спин-орбитальное взаимодействие. Обобщение на случай, когда названное взаимодействие существенно, дано в § 22.

Здесь $n^{(0)}(\lambda)$ — среднее число заполнения состояния λ в отсутствие взаимодействия

$$n^{(0)}(\lambda) = \frac{1}{e^{-\beta\mu + \beta W(\lambda)} + 1}.$$

Нам удобно в этой главе явно выделить химический потенциал μ ; при этом $W(\lambda)$ суть, очевидно, собственные значения не обобщенного, а обычного гамильтониана. Для собственных значений обобщенного гамильтониана мы сохраним символ E . Подчеркнем, что речь идет сейчас о гамильтониане, по определению не содержащем взаимодействия между частицами. Поэтому спектр $W(\lambda)$, вообще говоря, не совпадает с экспериментально определяемым. В частности, эффективные массы, которые будут введены в дальнейшем, суть «затравочные» массы (в смысле квантовой теории поля). В металлах они никогда не совпадают с определяемыми, например, из гальваномагнитных явлений; с другой стороны, в полупроводниках можно реализовать условия, когда взаимодействие между электронами практически исчезает, и тогда параметры, характеризующие функцию $W(\lambda)$, непосредственно определяются из опыта. Явные вычисления с выражением (18.1) весьма затруднительны, так как фактически функции $\varphi_\lambda(x)$ можно эффективно определить лишь в весьма грубом приближении. По этой причине, как уже говорилось в предыдущем параграфе, целесообразно воспользоваться каким-либо из вариантов метода эффективной массы, рассматривая $\varphi_\lambda(x)$ как «эффективные» волновые функции и учитывая периодическое поле просто путем введения некоторых параметров в невозмущенный гамильтониан. При этом рассматриваемая система делается пространственно однородной (соответственно, компенсирующий заряд надлежит считать равномерно размазанным по пространству). Как известно, при этом следует различать два случая:

а) «Невырожденный»¹⁾ (к этому же типу относится и случай чисто спинового вырождения). Расстояния между

¹⁾ Не следует смешивать рассматриваемые сейчас «невырожденный» и «вырожденный» случаи с ферми-вырождением. В смысле статистики, которой подчиняются частицы системы, последняя может быть как вырожденной, так и невырожденной в обоих случаях а) и б).

зонами в невозмущенной задаче велики по сравнению с характерной энергией взаимодействия, и виртуальными междо-зонными переходами можно пренебречь. При этом учет периодического поля осуществляется просто заменой оператора кинетической энергии на W ($-i\nabla_x$), где $W(\mathbf{k})$ — собственное значение энергии в невозмущенной задаче, $\mathbf{k}$ — квазиимпульс электрона (изменяющийся, строго говоря, в пределах первой зоны Бриллюэна).

б) «Вырожденный». Расстояния между некоторыми из зон не слишком велики, и соответствующие виртуальные переходы следует принимать во внимание. Для учета периодического поля здесь следует заменить обычный оператор кинетической энергии квадратной матрицей T_{ij} ($-i\nabla_x$), где индексы i, j пробегают конечный набор значений; «эффективная волновая функция» при этом также является матрицей. Такая постановка задачи, в частности, необходима, если валентные электроны энергетически не слишком сильно отделены от всех остальных, и электроны внутренних оболочек надо рассматривать на равных правах с валентными. Этот же случай надо рассматривать при наличии нескольких типов заряженных частиц.

В настоящем параграфе мы будем рассматривать только случай а). Соответственно выражение (18.1) принимает вид

$$G_{c,ss'}^{(0)}(x, x') = \Delta(s - s') \int d\mathbf{k} e^{-i(\mathbf{k}, x - x')} G_c^{(0)}(\mathbf{k}), \quad (18.2)$$

где

$$G_c^{(0)}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \cdot \frac{k_0 - W(\mathbf{k}) + i\varepsilon [2n^{(0)}(\mathbf{k}) - 1]}{[k_0 - W(\mathbf{k})]^2 + \varepsilon^2}. \quad (18.3)$$

Принятая аппроксимация, очевидно, несколько шире метода эффективной массы в стандартном его варианте: последний получается, если, помимо всего прочего, аппроксимировать зависимость $W(\mathbf{k})$ квадратичной формой, что в металлах возможно отнюдь не всегда. В этом смысле устоявшееся название «метод эффективной массы», по-видимому, не вполне удачно (лучше говорить об «эффективной кинетической энергии»).

Векторный потенциал электромагнитного поля, переносящего взаимодействие между частицами, в рассматриваемом случае можно считать равным нулю. Следовательно, из всех

компонент тензора $D_{c, \mu\nu}(x, x')$ остается лишь компонентом $D_{c, 00}$:

$$D_{c, 00}^{(0)}(x, x') = \int dk d\omega e^{-i\omega(x_0 - x'_0) + i(\mathbf{k}, \mathbf{x} - \mathbf{x}')} D_{c, 00}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega), \quad (18.4)$$

причем для $D_{c, 00}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$ можно воспользоваться нерелятивистским выражением (5.39)

$$D_{c, 00}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \equiv D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4 k^2}. \quad (18.5)$$

Это означает, в частности, что уравнения Максвелла в данном случае сводятся просто к уравнению Пуассона. Обратим внимание, что в излагаемом методе не возникает никаких затруднений с учетом дополнительного условия Лоренца, накладываемого на 4-потенциал: оно обеспечивается автоматически благодаря специальному виду тензоров $D_{\mu\nu}$ и $\mathcal{P}_{\mu\nu}$ (5.35) и (9.15); в данном случае дополнительное условие должно выполняться, естественно, лишь с точностью до величин порядка $1/c^2$.

Заметим, наконец, что в принятом приближении $\Gamma^{(0)} = 1$.

Как видно из (18.5) (и очевидно заранее — по постановке задачи), в исходном приближении никаких возбуждений бозевского типа нет, иначе говоря, функция $D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$ не имеет полюсов в плоскости ω (и вообще не зависит от ω). Из формулы (11.2), однако, явствует, что фактически такие возбуждения могут существовать, будучи обусловлены взаимодействием между частицами (и связанным с ним перераспределением плотности заряда¹⁾). Для исследования этого вопроса достаточно найти полную бозонную функцию Грина $D_c(\mathbf{k}, \omega)$, т. е. в силу (11.2) поляризационный оператор системы, $\mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega)$ [вследствие нерелятивистского характера задачи тензоры $D_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega)$ и $\mathcal{P}_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega)$ сводятся к скалярам подобно переходу от (5.35) к (5.40)]. Вычислив поляризационный оператор и, следовательно, функцию $D_c(\mathbf{k}, \omega)$, мы в соответствии с общей теорией §§ 4, 5 определим спектр

¹⁾ Возбуждения, представляющие собой колебания объемной плотности заряда, многократно служили предметом исследования в связи с физикой плазмы газового разряда. В соответствии с установившейся терминологией мы будем называть их плазменными колебаниями.

плазменных колебаний, разыскивая особые точки спектральной функции

$$J(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2 \operatorname{Im} D_c(\mathbf{k}, \omega)}{1 + e^{-\beta E}}.$$

Согласно (11.2) и (18.5) мы имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} D_c(\mathbf{k}, \omega) &= \operatorname{Im} \frac{D_c^{(0)}(\mathbf{k})}{1 - (2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}) \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega)} = \\ &= \frac{(2\pi)^8 [D_c^{(0)}(\mathbf{k})]^2 \operatorname{Im} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega)}{[1 - (2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}) \operatorname{Re} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega)]^2 + [(2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \operatorname{Im} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega)]^2}, \end{aligned}$$

и следовательно, задача сводится к решению уравнения¹⁾

$$\begin{aligned} [1 - (2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}) \operatorname{Re} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega)]^2 + \\ + [(2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \operatorname{Im} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega)]^2 = 0 \quad (18.6) \end{aligned}$$

или

$$1 - (2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}) \operatorname{Re} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega) \pm i (2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}) \operatorname{Im} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (18.6a)$$

Пусть решение этого (вообще говоря, трансцендентного) уравнения есть $\omega(\mathbf{k}) = \omega_{pl}(\mathbf{k}) - i\gamma(\mathbf{k})$. Здесь $\omega_{pl}(\mathbf{k})$ и $\gamma(\mathbf{k})$ суть вещественные функции, причем следует считать $\gamma(\mathbf{k}) \geq 0$ (см. гл. I). Этим определяется выбор знака в уравнении (18.6a). Как уже неоднократно отмечалось (см., например, § 16), представление об элементарных возбуждениях имеет смысл лишь постольку, поскольку затухание достаточно мало. В связи с этим предположим заранее, что $\omega_{pl} \gg \gamma$. Соответственно припишем мнимой части поляризационного оператора формальный малый параметр ϵ и будем искать решение уравнения (18.6) [или (18.6a)] в виде ряда по степеням ϵ .

¹⁾ Естественно, для решения (18.6) следует вычислить поляризационный оператор $\mathcal{F}$ как функцию комплексного аргумента ω . Подчеркнем, что это ни в коей мере не означает аналитического продолжения функции $D_c(\mathbf{k}, \omega)$ в комплексную плоскость (последнее, как мы знаем, невозможно).

В нулевом приближении величина $\omega_{pl}(\mathbf{k})$ определяется как вещественный корень уравнения

$$1 - (2\pi)^8 D_c^{(0)}(\mathbf{k}) \operatorname{Re} \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (18.7)$$

Это уравнение называется дисперсионным, ибо оно определяет закон дисперсии квазичастиц — вид функции $\omega_{pl}(\mathbf{k})$. Далее, для «константы затухания» $\gamma(\mathbf{k})$ получим

$$\gamma(\mathbf{k}) = \left| \frac{\operatorname{Im} \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega_{pl}(\mathbf{k}))}{\frac{\partial}{\partial \omega} \operatorname{Re} \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega) |_{\omega = \omega_{pl}(\mathbf{k})}} \right|. \quad (18.8)$$

Естественно, определив ω_{pl} и γ , надлежит проверить выполнение неравенства $\omega_{pl} \gg \gamma$. В связи с этим в принципе возможны три случая. Во-первых, может оказаться, что в некоторой области значений волнового вектора величина $\operatorname{Im} \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega) = 0$ и, следовательно, $\gamma(\mathbf{k}) = 0$. Тогда уравнение (18.7) будет точным, и вещественные корни его определяют незатухающие колебания. Комплексные корни (18.7), по-видимому, не представляют интереса, ибо вещественные и мнимые части их будут, вообще говоря, одного порядка. Во-вторых, возможен случай, когда $\operatorname{Im} \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega_{pl}(\mathbf{k})) = 0$, где $\omega_{pl}(\mathbf{k})$ — вещественный корень уравнения (18.7). Тогда в данном приближении $\gamma(\mathbf{k}) = 0$; иначе говоря, затухание есть величина высшего порядка по ϵ . Наконец, может случиться (в § 20 мы увидим, что это действительно бывает), что при определенных значениях $\mathbf{k}$ неравенство $\omega_{pl} \gg \gamma$ не выполняется. Это будет обозначать невозможность существования плазменных колебаний с такими волновыми числами, и таким путем возникает одна из «естественных границ» плазменного спектра.

Заметим, что сам факт существования чисто вещественных корней уравнения (18.7) отнюдь не тривиален (в принципе их могло бы и не быть). В §§ 19 и 20 мы увидим, что уравнение (18.7) имеет вещественные корни лишь при достаточно малых значениях $\mathbf{k}$; тем самым получается еще одна «естественная граница» плазменного спектра. Это обстоятельство было, по-видимому, впервые обнаружено в работе [20]. Впоследствии (другим методом) такой же результат был получен в [22], [23].

Для вычисления поляризационного оператора воспользуемся развитой в § 11 улучшенной теорией возмущений. В первом исчезающем приближении мы получаем согласно (11.4)

$$\mathcal{P}(k, \omega) = -\frac{2ie^2}{(2\pi)^3} \int dk' \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\omega' - W(k') + i\varepsilon [2n^{(0)}(k') - 1]}{[\omega' - W(k')]^2 + \varepsilon'^2} \times \\ \times \frac{\omega' - \omega - W(k' - k) + i\varepsilon [2n^{(0)}(k' - k) - 1]}{[\omega' - \omega - W(k' - k)]^2 + \varepsilon^2}. \quad (18.9)$$

Здесь множитель 2 возник благодаря взятию шпура по спиновым индексам. Проинтегрируем по ω' , замыкая контур в верхней ω' -полуплоскости (в соответствии с правилом (5.5)). Получаем

$$\mathcal{P}(k, \omega) = \frac{2e^2}{(2\pi)^7} \int dk' n^{(0)}(k') \left\{ \frac{1}{W(k') - W(k' - k) - \omega + i\varepsilon} + \right. \\ \left. + \frac{1}{W(k') - W(k' + k) + \omega + i\varepsilon} + \frac{2i\varepsilon n^{(0)}(k' - k)}{[W(k') - W(k' - k) - \omega]^2 + \varepsilon^2} \right\}. \quad (18.10)$$

Примем теперь во внимание известные равенства

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \pi \delta(x), \quad (18.11)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} = \frac{1}{x}, \quad (18.12)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{1}{x} \mp \pi i \delta(x). \quad (18.13)$$

Здесь x — вещественная величина, и $1/x$ в правых частях (18.12) и (18.13) надо понимать в смысле главного значения. Тогда равенство (18.10) дает (при вещественных ω)

$$\text{Re } \mathcal{P}(k, \omega) = \frac{2e^2}{(2\pi)^7} \int dk' n^{(0)}(k') \mathcal{P} \left\{ \frac{1}{W(k') - W(k' - k) - \omega} + \right. \\ \left. + \frac{1}{W(k') - W(k' + k) + \omega} \right\}. \quad (18.14)$$

Мнимая часть $\mathcal{P}$ появляется, если при $\varepsilon = 0$ хотя бы один из знаменателей в (18.10) обращается в нуль, т. е. если хотя бы для некоторых значений k , имеет место равенство

$$W(k') - W(k' \pm k) \pm \omega = 0.$$

При вычислении затухания по формуле (18.8) в качестве ω сюда следует подставить (вещественную!) частоту плазменных колебаний $\omega_{pl}(\mathbf{k})$. Таким образом, условие обращения знаменателя в нуль есть не что иное, как закон сохранения энергии (и импульса), который должен выполняться при реальном (а не виртуальном) испускании и поглощении плазменных квантов носителями тока. С другой стороны, поправки к энергии, описываемые вещественной частью поляризационного оператора (18.14) с этим условием отнюдь не связаны, будучи обусловлены виртуальными процессами. Это обстоятельство ни в коей мере не специфично для данного конкретного случая, а носит вполне общий характер.

Для достаточно длинных волн (малые $\mathbf{k}$) правую часть (18.14) в интересующем нас сейчас случае можно приближенно вычислить, не специализируя вида функции $W(\mathbf{k})$. Именно, предположим заранее (это будет оправдано последующим расчетом), что плазменная частота $\omega_{pl}(\mathbf{k})$ остается конечной при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Тогда правую часть (18.14) можно разложить в ряд по степеням $\mathbf{k}$. Введем тензоры

$$\mu_{ij} = \frac{3}{8\pi} \int d\mathbf{k}' n^{(0)}(\mathbf{k}') \frac{\partial^2 W(\mathbf{k}')}{\partial k'_i \partial k'_j}, \quad (18.15)$$

$$\sigma_{ijmn} = \frac{9}{8\pi} \int d\mathbf{k}' n^{(0)}(\mathbf{k}') \frac{\partial^2 W(\mathbf{k}')}{\partial k'_i \partial k'_j} \frac{\partial W(\mathbf{k}')}{\partial k'_m} \frac{\partial W(\mathbf{k}')}{\partial k'_n}, \quad (18.16)$$

$$\nu_{ijmn} = \frac{1}{32\pi} \int d\mathbf{k}' n^{(0)}(\mathbf{k}') \frac{\partial^4 W(\mathbf{k}')}{\partial k'_i \partial k'_j \partial k'_m \partial k'_n}. \quad (18.17)$$

Интегрирование по $\mathbf{k}'$ здесь (как и в (18.9)) производится, строго говоря, в пределах первой зоны Бриллюэна. В некоторых задачах, однако, существенную роль играет лишь сравнительно небольшая область $\mathbf{k}'$ -пространства [в которой заметно отлична от нуля функция $n^{(0)}(\mathbf{k}')$]. Тогда без большой ошибки можно интегрировать и в бесконечных пределах.

В обозначениях (18.15) — (18.17) равенство (18.14) (при конечном ω) принимает вид

$$\text{Re } \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega) =$$

$$= \frac{8e^2}{3(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{\omega^2} \left\{ \mu_{ij} k_i k_j + \nu_{ijmn} k_i k_j k_m k_n + \sigma_{ijmn} \frac{k_i k_j k_m k_n}{\omega^2} \right\} + O(k^6). \quad (18.18)$$

Очевидно, μ_{ij} есть среднее (по занятой электронами области) значение тензора обратной эффективной массы; тензоры же σ_{ijmn} и ν_{ijmn} характеризуют более тонкие детали изоэнергетической поверхности. Подставляя (18.18) в уравнение (18.7) и принимая во внимание (18.5), получаем (с принятой степенью точности)

$$\omega_{pl}^2(k) = \frac{2e^2}{3\pi^2} \cdot \frac{k_i k_j}{k^2} (\mu_{ij} + \nu_{ijmn} k_m k_n) + \frac{\sigma_{ijmn} k_i k_j k_m k_n}{\mu_{ij} k_i k_j} + O(k^6). \quad (18.19)$$

Это выражение определяет (при малых k) плазменные частоты в твердом теле при любой степени ферми-вырождения носителей тока и при любой зависимости $W(k)$ (лишь бы энергетические зоны оставались невырожденными в указанном выше смысле). Оно обобщает и уточняет результат работы [19], в которой, по-видимому, вследствие недостаточной точности примененного там метода расчета пропущен характерный для анизотропных систем член с ν_{ijmn} . Нетрудно было бы выписать и следующие члены разложения $\text{Re } \mathcal{P}$ и ω_{pl} по степеням k , но они в силу своей малости не представляют интереса. Заметим, что в общем случае произвольной анизотропии функция (18.19) не аналитична при $k \rightarrow 0$: предельная частота ω_0^2 зависит от ориентации вектора k . В более общей форме этот результат был получен (другим методом) в работе [28].

Легко видеть, что волны, частоты которых даются формулой (18.19), продольные. Действительно, напряженность электрического поля в данном случае дается просто градиентом скалярного потенциала (с обратным знаком); следовательно, для данной компоненты Фурье она параллельна (или антипараллельна) волновому вектору k . Из формулы (18.19) следует, что предположение о конечности $\omega_{pl}^2(k)$ при $k \rightarrow 0$ справедливо лишь, если тензор μ_{ij} не равен нулю. Равенство $\mu_{ij} = 0$ имеет место, например, для целиком заполненной зоны, когда $n^{(0)}(k') = 1$ при всех k' . Если тензор μ_{ij} равен нулю, то разложение (18.18) оказывается несостоятельным при $\omega = \omega_{pl}$. Однако решение уравнения (18.7) при малых k

можно найти и в этом случае; мы получаем (при $\mu_{ij} = 0$, $\nu, \sigma \neq 0$)

$$\omega_{pl}^2(k) = a_{ij} k_i k_j, \quad (18.20)$$

где a_{ij} — некоторый постоянный тензор. Легко найти и явное выражение для a_{ij} .

Заметим, что равенство (18.19) имеет смысл лишь при условии положительной определенности квадратичной формы $\mu_{ij} k_i k_j$ ($\omega_{pl} \in \text{Re}$ по определению). Это условие, однако, ни из каких общезначимых соображений не вытекает. Отсюда следует, что решения вида (18.19) (представляющие собой, как мы сейчас увидим, плазменные колебания обычного типа) возможны не при любом виде функций $W(k)$ и $n^{(0)}(k)$.

Чтобы окончательно уяснить себе физическую природу возбуждений, спектр которых дается формулой (18.19), вычислим тензор μ_{ij} для частного случая, когда $W(k)$ есть квадратичная функция

$$W(k) = \frac{1}{2} m_{ij}^{-1} (k_i - k_i^{(0)}) (k_j - k_j^{(0)}). \quad (18.21)$$

Здесь величины $k_i^{(0)}$ суть координаты точки, в которой функция $W(k)$ имеет минимум, а m_{ij}^{-1} — компоненты тензора обратной эффективной массы. Начало отсчета энергии выбрано так, что $W(k^{(0)}) \geq 0$. В частности, в системе координат, определяемой главными осями тензора m_{ij}^{-1} , мы имеем

$$W(k) = \sum_{i=1}^3 \frac{(k_i - k_i^{(0)})^2}{2m_i}. \quad (18.22)$$

Подчеркнем, что даже в кубическом кристалле главные значения тензора эффективной массы m_1, m_2, m_3 отнюдь не обязаны совпадать друг с другом. Действительно, минимум энергии может лежать и не в центре зоны Бриллюэна, а в точке низшей симметрии¹⁾ (тогда вектор $k^{(0)}$ отличен от нуля). При этом функция $W(k)$ имеет, разумеется, не один, а несколько минимумов, координаты которых связаны друг с другом допустимыми в данной кристаллографической системе

¹⁾ Именно так обстоит дело, например, в кристаллах германия и кремния [3].

преобразованиями симметрии. Если расстояния между минимумами в $\mathbf{k}$ -пространстве достаточно велики, то интеграл в (18.15) (как и в (18.16), (18.17)) можно приближенно представить в виде суммы членов, в каждом из которых интегрирование производится лишь в окрестности одного из минимумов. Очевидно, для вычисления интеграла достаточно явно вычислить лишь одно слагаемое, усреднив затем по всем ориентациям вектора $\mathbf{k}^{(0)}$ относительно осей кристалла. Именно так мы и будем поступать в дальнейшем. Следует, однако, заметить, что в настоящее время еще не ясно, в какой мере оправдана эта аппроксимация для тех или иных конкретных кристаллов. Таким путем легко находим (для кристалла кубической системы)

$$\mu_{ij} = \frac{3}{8\pi} \delta_{ij} \frac{1}{m^*} \int d\mathbf{k}' n^{(0)}(\mathbf{k}'), \quad (18.23)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_j}. \quad (18.24)$$

Интеграл, фигурирующий в (18.23), дает полную концентрацию электронов n :

$$\frac{2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' n^{(0)}(\mathbf{k}') = n. \quad (18.25)$$

Таким образом,

$$\mu_{ij} = \frac{3\pi^2}{2m^*} n \delta_{ij}. \quad (18.26)$$

Легко вычислить также тензоры χ и σ . Первый из них в данном случае, очевидно, равен нулю, а для второго мы получаем (до усреднения)

$$\sigma_{ijmn} = 3\pi^2 \delta_{ij} \delta_{mn} n \frac{\tilde{W}(T, n)}{m_i^2 m_n}. \quad (18.27)$$

Подставляя выражения (18.26) и (18.27) в формулу (18.19) для ω_{pl}^2 и переходя к обычной гауссовой системе единиц (для чего надо заменить e^2 на $4\pi e^2$), получаем окончательно

$$\omega_{pl}^2(\mathbf{k}) = \frac{4\pi n e^2}{m^*} + \frac{4}{\hbar^2} \tilde{W}(T, n) \langle W(\mathbf{k}) \rangle_{\text{Av.}} + 0(k^4). \quad (18.28)$$

Здесь $\tilde{W}(T, n)$ есть средняя (невозмущенная) энергия электрона, а символ $\langle \dots \rangle_{\text{Av.}}$ означает усреднение по всем

минимумам. В частности, если $m_1 = m_2 = m_3 = m$ (изотропная модель), то $m^* = m$, и мы получаем хорошо известную формулу Лэнгмюра для предельной плазменной частоты

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{pl}^2(k) \equiv \omega_0^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}. \quad (18.29)$$

Напомним, что в диэлектрике под величиной ϵ^2 следует понимать квадрат заряда, деленный на диэлектрическую проницаемость решетки. Второе слагаемое в (18.28) при этом также принимает известный вид

$$2\tilde{W}(T, n) \frac{k^2}{m}. \quad (18.30)$$

Как видно из (18.23), значение предельной частоты ω_0 не зависит от степени вырождения электронного газа, определяясь только полной концентрацией заряженных частиц (функция $n^{(0)}(k)$ может быть как фермиевской, так и бозе-майнсовской).

Итак видно, что наша методика действительно позволяет без труда получить как хорошо известное классическое выражение для плазменной частоты, так и обобщение его на случай произвольной анизотропии изоэнергетических поверхностей. Это обстоятельство не вызывает удивления, ибо мы фактически точно следуем обычной процедуре разыскания плазменных частот (см., например, обзор [24]). Действительно, в классической теории плазменные частоты определяются как корни уравнения $\text{Re } \epsilon(\omega, k) = 0$. В § 11 мы видели, однако, что выражение $1 - (2\pi)^3 D_c^{(0)} \mathcal{P}$ как раз и играет роль обобщенной диэлектрической проницаемости. Таким образом, уравнение (18.7) тождественно условию $\text{Re } \epsilon(\omega, k) = 0$ ¹⁾. Однако даже и в этом случае метод функций Грина обладает известными преимуществами перед обычной техникой кинетического уравнения, так как

а) дает выражения, справедливые не только в классической, но и в квантовой области;

б) позволяет легко установить фактические пределы применимости получающихся формул (см. следующие два параграфа, а также § 11).

¹⁾ Заметим также, что формулу для ω_0^2 можно было бы получить и непосредственно из выражения для вещественной части диэлектрической проницаемости (14.35).

Дальнейшее исследование плазменного спектра, в частности, исследование затухания и естественной границы спектра, удобно проводить раздельно для полностью вырожденного и невырожденного газа, о которых мы в дальнейшем будем говорить как о случаях Ферми и Больцмана.

§ 19. Плазменный спектр электронного газа; случай Ферми¹⁾

В этом параграфе мы исследуем электронную плазму в металле, где систему электронов можно считать полностью вырожденной: в отсутствие взаимодействия все состояния с энергией ниже μ заняты, все состояния с энергией выше μ свободны. Таким образом,

$$n^{(0)}(\mathbf{k}') = \theta[\mu - W(\mathbf{k}')], \quad (19.1)$$

и для средней энергии $\tilde{W}$ в квадратичной аппроксимации (18.22) мы получаем $\tilde{W} = \frac{3}{5} \mu$. Следовательно,

$$\omega_{pl}^2(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{m^*} + \frac{12\mu}{5\hbar^2} \langle W(\mathbf{k}) \rangle_{Av.} + O(k^4). \quad (19.2)$$

Температура, естественно, не входит в выражение (19.2), так как мы приняли условие полного вырождения (19.1); функции Грина определяются при этом усреднением лишь по основному состоянию системы.

В изотропном случае ($m_1 = m_2 = m_3 = m$) второе слагаемое в правой части (19.2) принимает хорошо известный вид $\left(\frac{3}{5} v_F\right)^2 k^2$ ($v_F = \sqrt{\frac{2\mu}{m}}$ — скорость на поверхности Ферми).

Заметим, однако, что в применении к металлам формула (19.2) имеет в основном лишь методический интерес: в реальном металле зависимость $W(\mathbf{k})$, как правило, не сводится к простой квадратичной форме (18.22), а имеет гораздо более сложный вид. Соответственно для вычисления плазменных частот надлежит пользоваться общими формулами (18.19), (18.15) — (18.17) с функцией (19.1) в качестве $n^{(0)}(\mathbf{k}')$. Для кристаллов кубической системы можно воспользоваться также формулой (14.35), определяя плазменные частоты из условия $\text{Re } \varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = 0$.

¹⁾ См. [20], [21], [25].

Обратимся теперь к вопросу о затухании и границе плазменного спектра. Из формулы (19.2) в сочетании с (18.11) — (18.13) непосредственно вытекает, что при вещественных ω и достаточно малых k мнимая часть поляризационного оператора (18.10) равна нулю. Действительно, как мы видели, появление конечной мнимой части $\mathcal{P}$ при вещественных значениях ω связано с обращением в нуль знаменателей в (18.10):

$$W(k') - W(k' \pm k) \pm \omega = 0. \quad (19.3)$$

При малых k мы имеем

$$W(k') - W(k' \pm k) \approx \mp k_i \frac{\partial W(k')}{\partial k'_i} = \mp k_i v_i,$$

где $v(k) = \nabla_k W(k)$ — скорость электрона с квазиволновым вектором k . Далее, в качестве ω следует подставить интересующую нас величину $\omega_{pl}(k)$. Тогда условие (19.3) принимает вид

$$|(k, v(k))| = \omega_{pl}(k), \quad W(k) \leq \mu. \quad (19.4)$$

Иначе говоря, мнимая часть поляризационного оператора в указанных условиях может быть отлична от нуля лишь, если

$$v(k) \geq \frac{\omega_{pl}(k)}{k}, \quad W(k) \leq \mu, \quad (19.5)$$

т. е., в частности,

$$v_{\max} \geq \frac{\omega_{pl}(k)}{k}, \quad W(k) \leq \mu. \quad (19.6)$$

Здесь $v_{\max}$ есть максимальная скорость электронов; если скорость $v(k)$ монотонно возрастает с энергией $W(k)$, то $v_{\max} = v_F$. Равенство (19.6) неявно определяет нижний предел волновых векторов, при которых имеет место затухание.

Таким образом, при достаточно малых k уравнение (18.6) имеет чисто вещественные решения, т. е. в рассматриваемом приближении достаточно длинные плазменные волны в металле не затухают вообще¹⁾. Причина этого видна непосредственно

¹⁾ Здесь имеется в виду лишь затухание, обусловленное взаимодействием электронов друг с другом. Фактически плазменные волны в твердом теле всегда затухают благодаря рассеянию электронов на неидеальностях кристаллической решетки (фононах, атомах примеси и т. д.). В металле, однако, это обстоятельство не играет существенной роли, так как соответствующие «времена

из формул (19.5), (19.6): в отсутствие взаимодействия с колебаниями решетки, примесями и т. д. затухание плазменных колебаний обусловлено только переходом их энергии в фермиевскую ветвь. Однако для достаточно длинных волн этот переход невозможен, так как фазовая скорость плазменных волн (правая часть (19.5)) превышает максимальную скорость электронов.

Значение k , определяемое формулой (19.6), можно было бы принять за естественную верхнюю границу плазменного спектра. При более коротких длинах волн плазменные колебания начинают затухать. Однако, как уже отмечалось в § 18, естественная граница плазменного спектра может быть обусловлена и другой причиной: уравнение (18.7) не обязано иметь вещественные корни при любых k . Для исследования этого вопроса надо явно вычислить $\mathcal{P}(k, \omega)$ при всех значениях аргументов, что, очевидно, возможно лишь, когда известен вид $W(k)$. Фактически, однако, функция $W(k)$ известна лишь для достаточно малых волновых векторов (при значениях k , близких к постоянной обратной решетки, становится непригодным и сам метод эффективной массы). Поэтому здесь имеет смысл рассмотреть какой-либо модельный пример, и результаты, таким путем полученные, будут иметь, вообще говоря, лишь методическую ценность. Исключение составляет случай, когда вещественные решения (18.7) исчезают уже при достаточно малых k . В следующем параграфе мы увидим, что именно так обстоит дело в больцмановской плазме в полупроводниках. Мы ограничимся здесь простейшим случаем — квадратичной изотропной аппроксимацией, — полагая

$$W(k) = \frac{k^2}{2m}. \quad (19.7)$$

Тогда поляризационный оператор (18.10) легко вычисляется до конца. Удобно ввести безразмерные переменные, выражая k в единицах $k_F = mv_F$, а ω — в единицах μ (мы

затухания» (порядка времени свободного пробега) велики по сравнению с периодами плазменных колебаний. Заметим, что при желании можно было бы легко исследовать это затухание в рамках излагаемой методики: стоит лишь ввести в гамильтониан системы энергию взаимодействия электронов с соответствующими полями (например, фононным).

сохраним для новых переменных прежние обозначения, имея в виду, что это не сможет повести к недоразумениям). Выполняя интегрирование в (18.14), получаем

$$\operatorname{Re} \mathcal{P}(k, \omega) = \frac{g^2}{(2\pi)^4} \left\{ \frac{4k^2 - \omega^2 - k^4}{8k^3} \ln \left| \frac{\omega^2 - (2k - k^2)^2}{\omega^2 - (2k + k^2)^2} \right| - \right. \\ \left. - \frac{\omega}{4k} \ln \left| \frac{(\omega - 2k)^2 - k^4}{(\omega + 2k)^2 - k^4} \right| - 1 \right\}, \quad (19.8)$$

где

$$g^2 = \frac{2e^2}{\hbar v_F}. \quad (19.9)$$

Здесь заряд e выражен в гауссовых единицах. Величина g^2 играет роль безразмерной константы связи и, вообще говоря, отнюдь не мала.

Разложение правой части (19.8) в ряд для малых k (и конечных ω), естественно, вновь дает формулу (18.18) (если подставить в последнюю соответствующие значения тензоров μ , ν и σ). С другой стороны, из формулы (19.8) непосредственно видно, что при $\omega \in \operatorname{Re}$ и $k \sim 1$ (т. е. при волновом векторе порядка фермиевского) $\operatorname{Re} \mathcal{P}(k, \omega) < 0$, и следовательно, дисперсионное уравнение (18.7) не имеет вещественных корней (мнимая часть поляризационного оператора при этом может быть еще равна нулю). Таким образом, естественная граница спектра плазменных колебаний ($k \leq k_c$) действительно не навязывается, а вытекает из самой теории. Определение предельного волнового числа k_c сводится к исследованию области существования вещественных корней уравнения (18.7) с учетом (19.8). Мы, однако, не будем этого делать, ибо, как уже отмечалось, весь расчет носит чисто методический характер.

Перейдем теперь в соответствии с общей схемой § 11 к оценке точности принятого приближения с помощью группы перенормировки. Для выяснения существа дела достаточно ограничиться простейшим случаем изотропной квадратичной аппроксимации (19.7).

Все необходимые выкладки уже проделаны в § 11; надо лишь найти явное выражение для фигурирующей в (11.20) функции f . Положим, как и в § 11, $\hbar = 2m = 1$, $W_0 = \mu$.

Тогда согласно (11.15) $\frac{u}{v} = \frac{k^2}{\mu} \equiv z$, и мы получаем в силу (11.13) и (19.8)

$$f(z) = \frac{1}{(2\pi)^2 z} \left\{ \frac{4-z}{4\sqrt{z}} \ln \left| \frac{2-\sqrt{z}}{2+\sqrt{z}} \right| - 1 \right\} \leq 0. \quad (19.10)$$

Равенство (19.10) в сочетании с (11.19) и (11.22) определяет инвариантный заряд, служащий фактическим параметром разложения. Поскольку $f(z) < 0$ при любом конечном z , видно, что инвариантный (экранированный!) заряд действительно всегда меньше g , как и указывалось в § 11. В частности, в области малых импульсов ($u \rightarrow 0$) инвариантный заряд стремится к нулю, и наша аппроксимация для функции $d(u, v; g^2)$ делается сколь угодно точной¹⁾. Это обстоятельство окажется существенным в связи с законом экранирования внешнего поля (см. ниже § 22). С другой стороны, в интересующем нас здесь «плазменном» случае инвариантный заряд, как видно из (11.22) и (11.30), есть

$$\frac{2e^2/\hbar v_F}{1 - 2 \frac{e^2}{\hbar v_F} f\left(\frac{\omega_{pl} + k^2}{\mu}\right)} < 2 \frac{e^2}{\hbar v_F}. \quad (19.11)$$

Отсюда видно, что:

а) фактический параметр разложения зависит от волнового вектора и частоты, отнюдь не сводясь к безразмерной константе g^2 ; иначе говоря, наш способ определения плазменных частот оправдан в том смысле, что следующие члены разложения не представляют собой просто степеней g^2/ω^2 ;

б) степень фактической применимости разложения при малых k определяется соотношением между плазменной частотой и энергией Ферми — аппроксимация тем лучше, чем больше отношение μ/ω_{pl} .

Последнее обстоятельство не связано с предположением (19.7); однако конкретная численная оценка параметра разложения зависит, разумеется, от вида изоэнергетических поверхностей. В квадратичной аппроксимации (19.7), как

¹⁾ Легко убедиться, что это утверждение не связано с предположением (19.7). Оно означает лишь невозможность распространения волн с нулевой энергией и конечным импульсом (т. е. отсутствие вещественных полюсов у бозонной функции Грина при $\omega = 0$, $k \neq 0$).

показывает исследование, достаточным условием применимости нашего разложения в области плазменных частот является неравенство

$$\frac{e^2/\hbar v_F}{1 + 2\sqrt{\frac{e^2}{\pi\hbar v_F}}} \ll 1. \quad (19.12)$$

При типичных для металлов значениях концентрации электронов n в левой части (19.12) стоит величина, близкая к единице. Следует, однако, иметь в виду, что в металле квадратичная аппроксимация едва ли имеет смысл; формулы, полученные в ее рамках, строго говоря, относятся не к металлу, а к модельному примеру свободного электронного газа. Неравенство (19.12) есть условие применимости так называемой аппроксимации высокой плотности. Оно выполняется тем лучше, чем больше концентрация электронов и чем меньше их эффективная масса. В этом смысле развитую методику можно рассматривать как уточнение и улучшение неоднократно применявшихся разными авторами (см., например, [22], [23]) простых разложений по константе связи (19.9).

§ 20. Плазменный спектр электронного газа; случай Больцмана¹⁾

Плазменный спектр больцмановского электронного газа неоднократно служил предметом исследования в связи с вопросами физики газового разряда. Ряд полученных там результатов можно непосредственно — простым изменением обозначений — перенести и на случай полупроводников. Однако последние обладают и известными специфическими особенностями, что делает изучение электронной (или дырочной) плазмы в них интересным не только в методическом отношении. Именно, концентрация свободных электронов в полупроводниках, как правило, больше (иногда значительно больше), чем в газовом разряде; соответственно плазменные эффекты в полупроводниках выступают гораздо ярче. Следует также иметь в виду, что концентрацию свободных зарядов в полупроводнике экспериментально сравнительно легко варь-

¹⁾ См. [26], [27].

ровать в широких пределах, оставляя все прочие условия неизменными. С повышенной по сравнению с газовым разрядом концентрацией электронов связана и вторая особенность плазмы в полупроводниках: там могут оказаться довольно заметными квантовые эффекты. Действительно, последние вступают в игру, коль скоро среднее расстояние между электронами ($\sim n^{-1/3}$) становится сравнимым с «тепловой» длиной волны $\lambda_T = \frac{h\sqrt{\beta}}{\sqrt{m}}$. Наконец, в отличие от газо-

вого разряда, при исследовании плазменных явлений в полупроводниках тяжелые частицы (доноры, акцепторы и т. д.) практически всегда можно считать неподвижными; соответственно с биполярной плазмой приходится иметь дело только в случае собственной проводимости. Для полупроводников типа германия и кремния наибольший интерес представляет как раз исследование плазмы с одним типом свободных зарядов, поскольку именно в таких образцах легче всего достигается желаемая большая концентрация носителей тока.

Применяя методику § 18 к полупроводникам, следует иметь в виду следующие обстоятельства.

Во-первых, полная концентрация электронов, которую мы все время считали заданной, в полупроводниках, строго говоря, отнюдь не задана, а способна флуктуировать (ибо носители тока создаются тепловым движением). Практически, однако, это не вносит каких-либо изменений в расчет, так как время рекомбинации (определяющее темп изменения n со временем), как правило, на несколько порядков превосходит период плазменных колебаний.

Во-вторых, в силу медленности процесса рекомбинации концентрация носителей тока может быть и не равновесной: неравновесные электроны и дырки, инжектируемые в образец светом или электрическим полем, также успевают принять участие в плазменных эффектах до того, как рекомбинируют.

В-третьих, как мы увидим, все плазменные эффекты в полупроводниках разыгрываются в области сравнительно малых волновых чисел, когда аппроксимация (18.22) довольно надежна. Напомним, что мы рассматриваем случай невырожденных зон (в смысле § 17). Вырожденный случай будет рассмотрен в § 22. Соответственно результаты, которые мы получим, будут иметь не только методическое значение.

В этом параграфе мы все время будем пользоваться аппроксимацией (18.22).

В-четвертых, в отличие от металлов, периоды плазменных колебаний в полупроводниках (при типичных концентрациях электронов) обычно сравнимы с временами свободного пробега (обусловленными рассеянием на фононах, примесях и т. д.) или, во всяком случае, не слишком превосходят их. Поэтому плазменные частоты, которые мы вычислим из уравнения (18.7), фактически представляют собой лишь «центры тяжести» довольно широких линий, а трактовка затухания не может быть достаточно полной без учета взаимодействия носителей тока с фононами, примесями и т. д.

Функция распределения в отсутствие взаимодействия в данном случае имеет вид

$$n^{(0)}(\mathbf{k}) = e^{\beta\mu - \beta W(\mathbf{k})}, \quad (20.1)$$

причем по смыслу аппроксимации мы должны считать $n^{(0)}(\mathbf{k}) \ll 1$, сохраняя всюду только величины первого порядка по $n^{(0)}(\mathbf{k})$. Соответственно

$$\tilde{W} = \frac{3}{2\beta} \equiv \frac{3}{2} \times T,$$

и формула (18.27) принимает вид

$$\omega_{pl}^2 = \frac{4\pi ne^2}{m^*} + \frac{3\pi T k^2}{m^*} + O(k^4). \quad (20.2)$$

В частности, в изотропной аппроксимации отсюда получается хорошо известный результат

$$\omega_{pl}^2 = \frac{4\pi ne^2}{m} + \frac{3\pi T}{m} k^2. \quad (20.3)$$

С другой стороны, при достаточно больших значениях k уравнение (18.7), как и в случае фермиевского газа, не имеет вещественных корней. В этом легко убедиться, явно вычисляя вещественную часть поляризационного оператора при вещественных значениях ω . В аппроксимации (18.22) мы получаем (в гауссовых единицах)

$$\text{Re } \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega) =$$

$$= -\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3 \hbar} \sqrt{\frac{\beta}{W(\mathbf{k})}} \int_0^\infty dx e^{-x^2} \cos\left(\frac{\beta \omega x}{\sqrt{\beta W(\mathbf{k})}}\right) \sin(x\sqrt{\beta W(\mathbf{k})}). \quad (20.4)$$

Правая часть легко выражается через интегралы Френеля, но удобнее оставить ее именно в таком виде. Разложение интеграла в ряд по степеням $k - k^{(0)}$ (при конечном значении ω) с последующим усреднением по всем возможным ориентациям $k^{(0)}$ вновь дает формулу (20.2). Наоборот, при достаточно больших $|k - k^{(0)}|$ правая часть (20.4), как легко убедиться, становится отрицательной: исследование уравнения (18.7) с вещественной частью поляризационного оператора в виде (20.4) (и $k^{(0)} = 0$) показывает, что вещественные корни существуют лишь при условии

$$k < k_c \cong \frac{0,53}{r_D}, \quad (20.5)$$

где

$$r_D = (4\pi n e^2 \beta)^{-1/2} \quad (20.6)$$

есть дебаевский радиус (в гауссовых единицах). Таким образом, и в больцмановском случае существование естественной границы плазменного спектра не навязывается *ad hoc*, а вытекает из самой теории [см., однако, ниже замечание после формулы (20.13)].

Переходя к рассмотрению затухания, обусловленного кулоновским взаимодействием между электронами, заметим прежде всего, что здесь, в отличие от фермиевского случая, мнимая часть поляризационного оператора никогда не обращается точно в нуль. Действительно, в больцмановском газе есть частицы, движущиеся с любыми скоростями; поэтому неравенство (19.5) может быть удовлетворено при любых k (т. е. всегда найдутся электроны со скоростями, превышающими фазовую скорость плазменной волны¹⁾). Отсюда следует, что уравнение (18.6) не имеет чисто вещественных решений, и затухание плазменных волн происходит всегда

¹⁾ Напомним, что мы имеем дело с нерелятивистской теорией, и следовательно, принципиально скорости электронов ничем не ограничены. Правда, при достаточно малых k скорости, удовлетворяющие неравенству (19.5), могут возрасти настолько, что нерелятивистское приближение делается неприменимым. Из дальнейшего будет видно, однако, что в таких условиях затухание, связанное с кулоновским взаимодействием между электронами, вообще очень мало, и этот механизм не играет роли по сравнению с другими причинами, приводящими к диссипации энергии плазменных волн

при любых k . Таким образом, вычисляя мнимую часть поляризационного оператора $\mathcal{P}(k, \omega)$, мы должны сразу положить (ср. § 5)

$$\omega = \omega' - i\omega'', \quad \omega'' > 0. \quad (20.7)$$

Величиной ε в формуле (18.10) при этом можно сразу пренебречь, так как функция $W(k)$ вещественна, и следовательно, знаменатели не имеют нулей.

В результате из (18.10) получаем

$$\begin{aligned} \text{Im } \mathcal{P}(k, \omega) &= \\ &= \frac{2e^2}{(2\pi)^7} \text{Im} \int d\mathbf{k}' n^{(0)}(\mathbf{k}') \left\{ \frac{1}{W(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - \omega' + i\omega''} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{W(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}' + \mathbf{k}) + \omega' - i\omega''} \right\}. \end{aligned} \quad (20.8)$$

Вычисление интеграла в правой части в общем виде несколько громоздко. Это, однако, и не требуется, ибо в дальнейшем нас будет интересовать лишь значение поляризационного оператора при $\omega' = \omega_{pl}$, $\omega'' = \gamma$; соответственно можно считать $\omega' \gg \omega''$. Тогда можно воспользоваться формулой (18.13), рассматривая ω'' формально как бесконечно малую величину:

$$\begin{aligned} \frac{1}{W(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}' \pm \mathbf{k}) \pm \omega' \mp i\omega''} &\cong \\ &\cong \frac{1}{W(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}' \pm \mathbf{k}) \pm \omega'} \pm \pi i \delta[W(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}' \pm \mathbf{k}) \pm \omega']. \end{aligned} \quad (20.9)$$

На основании (20.9) имеем

$$\begin{aligned} \text{Im } \mathcal{P}(k, \omega') &= -\frac{2e^2}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{k}' n^{(0)}(\mathbf{k}') \{ \delta[W(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - \omega'] - \\ &\quad - \delta[W(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}' + \mathbf{k}) + \omega'] \}. \end{aligned} \quad (20.10)$$

Это есть предельное значение $\text{Im } \mathcal{P}(k, \omega)$ при $\omega'' \rightarrow 0$, т. е. как раз то, что нужно для вычисления γ по формуле (18.8). В аппроксимации (18.22), когда $W(k)$ есть квадратичная форма, фигурирующий здесь интеграл легко вычисляется при любой степени вырождения электронного газа. В частности, в больцмановском случае, когда функция $n^{(0)}(k)$ дается фор-

мулой (20.1), мы получаем (переходя к гауссовым единицам)

$$\operatorname{Im} \mathcal{P}(k, \omega') = \frac{ne^2 \sqrt{2\beta} e^{-\frac{\beta W(k)}{4} - \frac{\beta \omega'^2}{4W(k)}}}{(2\pi)^{3/2} \hbar \sqrt{W(k)}} \operatorname{sh} \frac{\beta \omega' \hbar}{2}. \quad (20.11)$$

Поскольку вещественная часть поляризационного оператора нам уже известна, по формуле (18.8) легко найти множитель затухания плазменных колебаний. В частности, для малых волновых векторов мы получаем (в гауссовых единицах)

$$\gamma = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega_{pl}}{2}}{(kr_D)^3 \beta \hbar} e^{-\frac{1}{2(kr_D)^2}}. \quad (20.12)$$

При $\hbar \rightarrow 0$ это выражение переходит в известную формулу Ландау [29].

В силу конечности затухания вопрос о естественной границе плазменного спектра приобретает, как всегда в таких случаях, несколько условную форму. Наличие многих механизмов рассеяния вносит в него еще дополнительные осложнения. Поэтому мы не будем подробно его рассматривать; отметим лишь, что как неравенство (20.5), так и условие достаточной малости γ по сравнению с ω_{pl} дают примерно одно и то же значение критического волнового числа k_c . Действительно, подставляя в (20.12) значение $k = k_c/2$, получаем¹⁾ $\gamma \cong 0,05\omega_{pl}$ — затухание еще мало; в то же время при $k = k_c$ формула (20.12) дает $\gamma \cong \omega_{pl}$.

Как правило, в полупроводниках дебаевский радиус не менее чем на два-три порядка превышает постоянную решетки. Таким образом, длины плазменных волн оказываются действительно весьма большими, что и оправдывает использование аппроксимации (18.22). Заметим также, что в указанных условиях все плазменные частоты лежат в очень узкой области, отличаясь от ω_0 всего на 10—15%.

Обратимся теперь к оценке точности принятого приближения с помощью группы перенормировки. Как и в §§ 11

¹⁾ При этом следует принять во внимание, что в типичных для полупроводников условиях (и при комнатной температуре) $\operatorname{sh} \frac{\beta \omega_{pl} \hbar}{2}$ не превышает единицы.

и 19, ограничимся изотропной аппроксимацией, полагая

$$W(k) = \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (20.13)$$

В отличие от § 19, в данном случае имеется не один независимый безразмерный параметр, содержащий заряд e , а несколько. Поэтому вид безразмерной константы g нельзя навязывать а priori, а надо определить из условия предстимости произведения $(2\pi)^3 \mathcal{P}^{(0)}(k, \omega) D_c^{(0)}(k)$ в виде (11.20). Пользуясь формулами (5.39) и (20.4), легко усмотреть, что роль параметра W_0 в данном случае играет величина $\beta^{-1} = \kappa T$; для функции f мы получаем

$$f\left(\frac{u}{v}\right) = -\left(\frac{v}{u}\right)^{3/2} \int_0^\infty dt e^{-t^2} \sin\left(t \sqrt{\frac{u}{v}}\right) \equiv -\left(\frac{v}{u}\right)^{3/2} S\left(\frac{u}{v}\right), \quad (20.14)$$

где

$$S(z) = e^{-z} \int_0^{\sqrt{z}/2} e^{t^2} dt.$$

Далее,

$$g^2 = 2 \frac{W(k)}{\kappa T} \Big|_{k=r_D^{-1}} = \left(\frac{\hbar \omega_0}{\kappa T}\right)^2. \quad (20.15)$$

Вводя эффективное число состояний в зоне

$$N_c = \frac{2(2\pi m \kappa T)^{3/2}}{(2\pi \hbar)^3} \quad (20.16)$$

и «тепловую» скорость

$$v_T = \sqrt{3 \frac{\kappa T}{m}}, \quad (20.17)$$

можно представить константу связи (20.15) в виде

$$g^2 = 4 \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \frac{e^2}{\hbar v_T} \cdot \frac{n}{N_c} \quad (20.18)$$

(в гауссовых единицах). Эта величина не обязательно очень мала; однако, как мы видели в § 11, она и не является

параметром разложения. Роль последнего при определении функции $D_c(k, \omega)$ при $\omega = 0$ играет инвариантный заряд (11.22)

$$g_{\text{inv}}^2(u, v; g^2) = \frac{g^2}{1 - g^2 f\left(\frac{u}{v}\right)}.$$

В данном случае мы имеем на основании (20.14)

$$g_{\text{inv}}^2(u, v; g^2) = \frac{g^2}{1 + g^2 \left(\frac{v}{u}\right)^{3/2} S\left(\frac{u}{v}\right)}. \quad (20.19)$$

Как и следовало ожидать, $g_{\text{inv}}^2 < g^2$ при любых значениях u и v . В частности, при малых волновых числах ($k \ll r_D^{-1}$) параметр разложения g_{inv}^2 делается сколь угодно малым.

Далее, из формулы (11.30) явствует, что при определении функции $D(k, \omega)$ для не равных нулю значений ω (т. е., в частности, при определении плазменных частот ω_{pl}) параметром разложения служит величина

$$g_{\text{inv}}^2(t, v; g^2) = \frac{g^2}{1 + g^2 \left[\frac{\kappa T}{\hbar\omega + W(k)} \right]^{3/2} S\left[\frac{\hbar\omega + W(k)}{\kappa T} \right]}. \quad (20.20)$$

Отсюда, как и в § 19, следует, что наш способ определения плазменных частот всегда корректен в том смысле, что следующие члены разложения не имеют вида g^2/ω^2 в некоторой степени. Условие фактической применимости использованных разложений определяется соотношением между κT и плазменной частотой: сходимость тем лучше, тем больше отношение $\kappa T/\omega_{pl}$.

§ 21. Экранирование статического поля свободными зарядами ¹⁾

Для исследования фермиевской ветви энергетического спектра с помощью, например, уравнения (9.18) необходимо знать $\tilde{\Phi}$ — средний (экранированный) потенциал, создаваемый классическими источниками поля (например, заряженными

¹⁾ См. [21], [25], [26].

донорами и акцепторами в полупроводнике). Как мы видели в § 8, в линейной аппроксимации

$$\tilde{A}_\alpha(x) = - \int dy D'_{c,\alpha\beta}(x, y) J^\beta(y).$$

Здесь $D'_{c,\alpha\beta}$ есть функция Грина, вычисленная в отсутствие внешнего поля. Если в качестве D'_c подставить сюда «невозмущенное» значение $D'^{(0)}_c$ (18.5), мы получим выражение для потенциала $\tilde{A}_\alpha$ в пространстве, не содержащем свободных зарядов. Замена $D'^{(0)}_c$ на D'_c означает учет реакции свободных зарядов на внешнее поле, т. е. учет экранирования.

В данном случае нас интересует только компонента $\tilde{A}_0 = -\tilde{\varphi}$; классическая плотность тока J^β сводится к плотности заряда $J^0 = \rho(x)$. Представим D'_c и ρ в виде интегралов Фурье; тогда мы получим по образцу (11.6) — (11.8)

$$\tilde{\varphi}(x) = \int dk \frac{e^{ikx}}{k^2} \frac{\rho(k)}{1 - \frac{(2\pi)^4}{k^2} \mathcal{P}(k, \omega)} \Big|_{\omega=0}. \quad (21.1)$$

Заметим, что $\text{Im } \mathcal{P}(k, 0) = 0$, $\text{Re } \mathcal{P}(k, 0) < 0$, как это и должно быть.

Рассмотрим специально случай точечного заряда, когда

$$\rho(y) = eZ\delta(y), \quad (21.2)$$

где Z — целое число. Задача об экранировании поля такого центра свободными зарядами рассматривались неоднократно. В приближении Дебая закон экранирования оказывается экспоненциальным (формулы (21.3) — (21.9) в гауссовых единицах):

$$\tilde{\varphi}(x) = \frac{Ze}{r} e^{-r/r_D}, \quad r \equiv |x|. \quad (21.3)$$

С другой стороны, в методе дополнительных переменных (см. [10], [16], [17]) обрезание длинноволновых компонент поля дает

$$\tilde{\varphi}(x) = \frac{Ze}{r} \cdot \frac{2}{\pi} \int_{k_c r}^{\infty} \frac{\sin u}{u} du, \quad (21.4)$$

где k_c — «предельное» плазменное волновое число.

Мы покажем, что фактически эти два закона не противоречат друг другу, а представляют собой две различные асимптотические формы некоторого более сложного выражения.

Рассмотрим сначала простейший случай $W(k) = \frac{k^2}{2m}$.

Тогда в правой части (21.1) можно проинтегрировать по полярным углам вектора $\mathbf{k}$ (в качестве полярной оси выбираем направление вектора $\mathbf{x}$). Это дает

$$\tilde{\varphi}(r) = \frac{Ze}{r} \cdot \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \frac{\sin kr}{k} \cdot \frac{1}{1 - \frac{(2\pi)^4}{k^2} \mathcal{P}(k, 0)}. \quad (21.5)$$

На больших расстояниях от центра главную роль в интеграле играют малые k . Соответственно функцию $\mathcal{P}(k, 0)$ можно приближенно заменить ее значением при $k=0$, и мы получаем из (21.5)

$$\tilde{\varphi}(r) = \frac{Ze}{r} e^{-r/r_0}, \quad (21.6)$$

где

$$r_0^{-1} = (2\pi)^2 \sqrt{|\mathcal{P}(0, 0)|}. \quad (21.7)$$

Заметим, что вычисление $\mathcal{P}(0, 0)$ по формуле, например, (18.10) требует известной осторожности. В рассматриваемом случае, однако, можно воспользоваться явными выражениями (19.8) и (20.4). Это дает

а) в случае Ферми

$$r_0^{-1} = \sqrt{\frac{4}{\pi} \cdot \frac{e^2}{\hbar v_F}} k_F = 2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \sqrt{\frac{me^2}{\hbar^2} n^{1/3}}, \quad (21.8)$$

где k_F — значение волнового числа на поверхности Ферми;

б) в случае Больцмана

$$r_0^{-1} = \sqrt{4\pi\beta ne^2} = r_D^{-1}. \quad (21.9)$$

Таким образом, формула (21.6) представляет собой обычный закон Дебая. Расстояния, для которых он здесь получен, определяются условием

$$n(k) \cong 0 \quad \text{при} \quad k \gtrsim r_0^{-1}. \quad (21.10)$$

В случае Ферми условие (21.10) принимает вид

$$r \gg r_c \equiv k_F^{-1} = (3\pi^2 n)^{-1/3}, \quad (21.10a)$$

а в случае Больцмана

$$r \gg r_c \equiv \frac{\hbar \sqrt{\beta}}{\sqrt{m}}. \quad (21.10b)$$

С другой стороны, при малых r главную роль в интеграле (21.6) играют большие волновые числа. Как видно из (18.10), при этом независимо от типа статистики

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(k, 0) &\cong -\frac{2me^2}{(2\pi)^3 k^2} \int dk' n^{(0)}(k') + O(1/k^4) = \\ &= -\frac{nm e^2}{(2\pi)^4 k^2} + O(1/k^4). \end{aligned} \quad (21.11)$$

Подставляя (21.11) в (21.5), находим асимптотический вид потенциала на малых расстояниях (в гауссовых единицах)

$$\tilde{\varphi}(r) = \frac{Ze}{r} e^{-\alpha r} \cos \alpha r; \quad \alpha = \sqrt{2} \left(\frac{\pi n m e^2}{\hbar^2} \right)^{1/4}. \quad (21.12)$$

Этой формулой можно пользоваться, коль скоро $r < r_c$. Формула (21.12) заменяет классический закон Дебая в области, где существенно сказываются квантовые эффекты (расстояния сравнимы со средней длиной волны де-Бройля для экранирующих зарядов r_c). Точнее, она справедлива в «ультраквантовой» области $r \ll r_c$. Подчеркнем, что формулы (21.11) и (21.12) не зависят от степени вырождения электронного газа; последняя определяет лишь пределы их применимости.

Аппроксимация типа (21.4) подобно (21.12) получается из (21.5) в случае малых расстояний, если вместо разложения поляризационного оператора (21.11) воспользоваться более грубым приемом: просто отбросить второе слагаемое в знаменателе (21.5), обрывая вместе с тем интеграл на некотором нижнем пределе k_0 . Последний должен удовлетворять условию

$$\frac{n m e^2}{\hbar^2 k_0^4} \ll 1. \quad (21.13)$$

Тогда для потенциала мы получаем формулу типа (21.4), пригодную для расстояний $r \leq k_0^{-1}$. Теперь, однако, параметр k_0 никак не связан с предельным волновым числом k_c .

Более того, он вообще не имеет четкого физического смысла, определяясь лишь неравенством (21.13).

Обратимся теперь к произвольному закону дисперсии. При малых k разложение правой части (18.10) дает

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{P}(k, 0) &= \\ &= \frac{e^2}{2(2\pi)^7} \lim_{\substack{\eta \rightarrow 0 \\ \eta > 0}} \operatorname{Re} \int dk' n^{(0)}(k') \frac{n_\alpha n_\beta}{\left(n_\gamma \frac{\partial W(k')}{\partial k'_\gamma} + i\eta\right)^2} = \\ &= -\frac{e^2}{2(2\pi)^7} b, \quad b > 0, \quad n_\alpha = \frac{k'_\alpha}{k}; \quad (21.14) \end{aligned}$$

и мы вновь получаем формулу (21.6), причем

$$r_0^{-1} = \frac{\sqrt{be^2}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (21.15)$$

При $W(k) = \frac{k^2}{2m}$ формула (21.15), переходит в (21.8) или (21.9). В квадратичной анизотропной аппроксимации (18.22) получаются те же формулы с заменой

$$m \rightarrow \sqrt[3]{m_1 m_2 m_3}.$$

При больших k результат существенно зависит от вида функции $W(k)$ и не может быть выписан в общем виде, если только не оборвать интеграл (21.5) на некотором нижнем пределе, отбросив вообще поляризационный оператор. В этом последнем случае, разумеется, вновь получается формула (21.4) независимо от вида изоэнергетических поверхностей.

Степень фактической применимости полученных выше асимптотических формул для потенциала $\tilde{\varphi}$ зависит, естественно, от конкретного характера задачи. В металлах заранее ясно, что, поскольку все существенные расстояния — порядка постоянной решетки, обе аппроксимации (21.6) и (21.12) мало удовлетворительны (не говоря уже о сугубой ненадежности квадратичного закона дисперсии). С другой стороны, в полупроводниках параметр r_c оказывается близким к 10^{-6} см (при комнатной температуре); таким образом, может найтись область, в которой следует пользоваться квантовой формулой (21.12). Следует, однако, иметь в виду, что на слишком малых расстояниях формула (21.12) может оказаться

несостоятельной ввиду недопустимости линейной аппроксимации (8.17). Так, в этой аппроксимации теряется (в принципе возможный) эффект возникновения локальных плазменных колебаний. Это обстоятельство может сузить фактические пределы применимости выражения (21.12).

Могло бы показаться, что подобно взаимодействию электронов с внешним полем можно рассмотреть и взаимодействие их друг с другом. Именно так и ставится задача, например, в работах Бома и Пайнса (см., например, обзоры [10], [11]). Строго говоря, однако, представление о потенциале взаимодействия между электронами в твердом теле лишено смысла, ибо, благодаря обмену виртуальными плазменными квантами, взаимодействие между электронами оказывается запаздывающим. Рассмотрим здесь этот вопрос применительно к случаю полностью вырожденного ферми-газа ($T=0$). Тогда можно воспользоваться обычной теорией S -матрицы (см. приложение I) и ввести эффективную матрицу взаимодействия

$$U(x, x') = 2\pi e^2 \int d\mathbf{k} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}')} D_c(\mathbf{k}, k_0) \Big|_{k_0 = \Delta\omega}. \quad (21.16)$$

Здесь $\Delta\omega$ есть изменение энергии одного из электронов при рассеянии на другом. Если это изменение энергии достаточно мало,

$$\Delta\omega \ll \mu, \quad \Delta\omega \ll W(\mathbf{k}), \quad (21.17)$$

то $D(\mathbf{k}, \Delta\omega) \cong D(\mathbf{k}, 0)$. При этом выражение (21.16) перестает зависеть от начального и конечного состояний электронов и может рассматриваться как обычная потенциальная энергия взаимодействия. Правая часть (21.16) при этом, разумеется, совпадает с $e\tilde{\varphi}$, если для $\tilde{\varphi}$ воспользоваться выражением (21.1) с учетом (21.2) (при $Z=1$). В частности, в аппроксимации (11.4) для энергии взаимодействия между двумя электронами справедливы все выводы, сделанные ранее в этом параграфе применительно к взаимодействию электронов с точечным центром. Случай, характеризуемый неравенствами (21.17), представляет, вероятно, наибольший интерес в теории металлов. Принципиально, однако, возможен и случай, когда существенны конечные значения $\Delta\omega$; при этом (в полной аналогии с квантовой электродинамикой) представление о потенциале взаимодействия между электронами ввести вообще невозможно.

§ 22. Случай вырожденных зон ¹⁾

До сих пор мы ограничивались невырожденным (в смысле § 18) случаем. Охватывая довольно широкий круг задач, развитая методика все же не позволяет рассматривать ряд систем, интересных как с теоретической, так и с экспериментальной стороны. Именно, из рассмотрения выпадают все случаи, когда в невозмущенной задаче следует принимать во внимание зависимость энергии электрона не только от квазиимпульса, но и от каких-то дискретных квантовых чисел. К числу систем такого типа, в частности, относятся вещества, в которых:

а) невозмущенные значения энергии носителей тока образуют вырожденные зоны (например, дырочный германий и дырочный кремний);

б) не удается провести четкое энергетическое различие между валентной и внутренней оболочками (например, переходные металлы);

в) невозмущенная энергия носителя тока зависит от его спина (ферромагнетики, вещества с заметным спин-орбитальным взаимодействием);

г) заметную роль играют носители тока с зарядом как того, так и другого знака (полупроводники и металлы со смешанной проводимостью).

В настоящем параграфе будет показано, что развитая ранее методика в значительной мере может быть перенесена и на эти более сложные случаи.

Как известно [6], [8], [9], во всех перечисленных выше задачах простой «метод эффективной массы» неприменим: вместо одного уравнения с «эффективной кинетической энергией» W ($-i\nabla_x$) невозмущенная задача описывается системой уравнений

$$\{W_{ab}(\mathbf{k}) - \delta_{ab}W\} c_b = 0, \quad (22.1)$$

где W_{ab} — некоторая квадратная матрица, а индексы a, b нумеруют типы носителей тока, компоненты спина и т. д. (соответственно набор значений, ими принимаемых, специфичен для каждой данной задачи). Собственные значения системы (22.1) суть собственные значения энергии в невозмущенной

¹⁾ См. [30].

задаче, а волновые функции представляют собой матрицы $c_a e^{ikx}$. Будем нумеровать собственные значения (22.1) индексом ν . Очевидно,

$$\sum_a \bar{c}_a(\nu, k) c_a(\nu', k) = \Delta(\nu - \nu'), \quad (22.2)$$

$$\sum_\nu \bar{c}_a(\nu, k) c_b(\nu, k) = \delta_{ab}. \quad (22.3)$$

Далее, из общих свойств движения частиц в периодическом поле следует, что W_{ab} и W — четные функции k .

Очевидно, в этом случае фермионная функция Грина представляет собой матрицу: вместо (18.3) мы имеем

$$\begin{aligned} G_{c,ab}^{(0)}(k) &= \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^4} \sum_\nu c_a(\nu, k) \bar{c}_b(\nu, k) \frac{k_0 - W(\nu, k) + i\varepsilon [2n^{(0)}(\nu, k) - 1]}{[k_0 - W(\nu, k)]^2 + \varepsilon^2}. \end{aligned} \quad (22.4)$$

С другой стороны, невозмущенная бозонная функция Грина сохраняет прежний вид (18.5), а поляризационный оператор представляет собой шпур по индексам a, b . Пользуясь, как и раньше, развитой в § 11 улучшенной теорией возмущений, для вещественной части поляризационного оператора получаем

$$\begin{aligned} \text{Re } \mathcal{P}(k, \omega) &= \frac{2e^2}{(2\pi)^7} \sum_{\nu, \nu'} \int dk' n^{(0)}(k', \nu) \times \\ &\times \mathcal{P} \left\{ \frac{S(\nu, \nu'; k', k)}{W(k', \nu) - W(k' - k, \nu') - \omega} + \frac{\bar{S}(\nu, \nu'; k', -k)}{W(k', \nu) - W(k' + k, \nu') + \omega} \right\}. \end{aligned} \quad (22.5)$$

Здесь

$$\begin{aligned} S(\nu, \nu', k', k) &= \\ &= \sum_{a,b} c_a(\nu, k') \bar{c}_a(\nu', k' - k) \bar{c}_b(\nu, k') c_b(\nu', k' - k). \end{aligned} \quad (22.6)$$

Если кристалл обладает центром симметрии, то в силу четности функций $c_a(\nu, k)$ имеем

$$S(\nu, \nu'; -k', k) = S(\nu, \nu'; k', -k).$$

Далее, из (22.2) следует, что

$$S(\nu, \nu'; k', k) = \Delta(\nu - \nu') + \\ + [1 - \Delta(\nu, \nu')] \sum_{\substack{n \geq 1 \\ m \geq 1}} k_{i_1} \dots k_{i_n} k_{j_1} \dots k_{j_m} A_{i_1 \dots i_n; j_1 \dots j_m}. \quad (22.7)$$

Здесь $i_1, \dots, j_m$ — векторные индексы, а величины A суть некоторые тензоры, зависящие от структуры зон в невозмущенной задаче. Их легко вычислить с помощью уравнения (22.1), однако соответствующие выражения нам не понадобятся. Заметим лишь, что тензоры A содержат в знаменателях (в разных степенях) величины $\Delta W(\nu, \nu'; k)$ — расстояния между ν -й и ν' -й зонами при квазиимпульсе k . Именно наличие этих (обычно неизвестных) функций и затрудняет практическое использование выражений для A .

На основании (22.7) мы имеем

$$\text{Re } \mathcal{P}(k, \omega) = \sum_{\nu} \text{Re } \mathcal{P}_{\nu}(k, \omega) + \Delta \mathcal{P}(k, \omega), \quad (22.8)$$

где $\mathcal{P}_{\nu}(k, \omega)$ — поляризационный оператор вида (18.10), вычисленный для ν -й зоны, а добавка $\Delta \mathcal{P}(k, \omega)$ содержит члены с $\nu \neq \nu'$.

Первое слагаемое в правой части (22.8) представляет собой просто сумму формально независимых вкладов отдельных зон; взаимное влияние последних проявляется при этом только при определении уровня Ферми. Если пренебречь вторым слагаемым, то все полученные ранее результаты переносятся на случай вырожденных зон с помощью простого суммирования по ν . Это относится, в частности, к предельной частоте плазменных колебаний и к радиусу экранирования. Так,

$$\omega_0^2 \approx \frac{2e^2}{3\pi^2} \cdot \frac{k_i k_j}{k^2} \sum_{\nu} \mu_{ij}(\nu). \quad (22.9)$$

Чтобы получить в этом приближении радиус экранирования, надо в правой части (21.15) выполнить суммирование по ν , снабдив этим индексом величину b .

С другой стороны, при учете члена $\Delta\mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega)$ появляются особенности, специфические именно для вырожденного случая: плазменные частоты могут расщепляться на несколько ветвей, а также может иметь место затухание, связанное с реальными междузонными переходами за счет энергии плазменных квантов. Вычисление этих эффектов в общем виде, однако, вряд ли целесообразно, так как результаты существенно зависят не только от констант, которые можно было бы определять эмпирически, но и от функций типа $\Delta W(\nu, \nu'; \mathbf{k})$.

ГЛАВА V

НОСИТЕЛИ ТОКА В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

§ 23. Идеальный полупроводник ¹⁾

В предыдущей главе были исследованы коллективные («плазменные») колебания в твердом теле. Как мы видели, они существенно обусловлены взаимодействием между электронами: при исчезновении его исчезают и соответствующие полюсы функции $D_c(k, \omega)$. Статистика, которой подчиняются плазменные кванты, очевидно, бозевская. Тем самым решена вторая из задач, поставленных в § 17, — задача об исследовании новых (по сравнению с идеальным газом) ветвей энергетического спектра системы ²⁾. В настоящем параграфе мы рассмотрим фермиевскую ветвь энергетического спектра (т. е. спектр носителей тока) в идеальном кристалле. Тем самым будет дан ответ на первый из поставленных ранее вопросов — об изменениях, вносимых взаимодействием в спектр «свободных» частиц. Как уже отмечалось в § 17, такая постановка задачи имеет смысл для полупроводников, но не для металлов. По этой причине мы ограничимся только случаем больцмановского газа, полагая $n^{(0)}(k) = e^{\beta\mu - \beta W(k)}$ (формально нетрудно было бы провести все выкладки и для полностью вырожденного ферми-газа). Далее мы будем

¹⁾ См. [1]—[4].

²⁾ Это решение, однако, не является исчерпывающим. При наличии свободных зарядов обоих знаков (электроны и дырки) плазменные колебания представляют собой лишь одну из возможных бозевских ветвей; другую составляют экситоны Мотта. В рамках нашего метода их удобно рассматривать с помощью двухфермионной функции Грина: часть полюсов последней — при учете взаимодействия — будет отвечать связанным состояниям системы «электрон — дырка» (в этом смысле ситуация здесь аналогична задаче о позитронии в квантовой электродинамике).

С другой стороны, при учете члена $\Delta\mathcal{P}(k, \omega)$ появляются особенности, специфические именно для вырожденного случая: плазменные частоты могут расщепляться на несколько ветвей, а также может иметь место затухание, связанное с реальными междузонными переходами за счет энергии плазменных квантов. Вычисление этих эффектов в общем виде, однако, вряд ли целесообразно, так как результаты существенно зависят не только от констант, которые можно было бы определять эмпирически, но и от функций типа $\Delta W(\nu, \nu'; k)$.

ГЛАВА V

НОСИТЕЛИ ТОКА В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

§ 23. Идеальный полупроводник ¹⁾

В предыдущей главе были исследованы коллективные («плазменные») колебания в твердом теле. Как мы видели, они существенно обусловлены взаимодействием между электронами: при исчезновении его исчезают и соответствующие полюсы функции $D_c(k, \omega)$. Статистика, которой подчиняются плазменные кванты, очевидно, бозевская. Тем самым решена вторая из задач, поставленных в § 17, — задача об исследовании новых (по сравнению с идеальным газом) ветвей энергетического спектра системы ²⁾. В настоящем параграфе мы рассмотрим фермиевскую ветвь энергетического спектра (т. е. спектр носителей тока) в идеальном кристалле. Тем самым будет дан ответ на первый из поставленных ранее вопросов — об изменениях, вносимых взаимодействием в спектр «свободных» частиц. Как уже отмечалось в § 17, такая постановка задачи имеет смысл для полупроводников, но не для металлов. По этой причине мы ограничимся только случаем больцмановского газа, полагая $n^{(0)}(k) = e^{\beta\mu - \beta W(k)}$ (формально нетрудно было бы провести все выкладки и для полностью вырожденного ферми-газа). Далее мы будем

¹⁾ См. [1]—[4].

²⁾ Это решение, однако, не является исчерпывающим. При наличии свободных зарядов обоих знаков (электроны и дырки) плазменные колебания представляют собой лишь одну из возможных бозевских ветвей; другую составляют экситоны Мотта. В рамках нашего метода их удобно рассматривать с помощью двухфермионной функции Грина: часть полюсов последней — при учете взаимодействия — будет отвечать связанным состояниям системы «электрон — дырка» (в этом смысле ситуация здесь аналогична задаче о позитронии в квантовой электродинамике).

рассматривать лишь систему, не вырожденную в смысле § 18, и притом в изотропной аппроксимации $W(k) = \frac{k^2}{2m}$.

Для решения интересующей нас задачи достаточно вычислить однофермионную функцию Грина. Мы воспользуемся теорией возмущений § 11, предполагая справедливыми два неравенства

$$\frac{n}{N_c} \cdot \frac{e^2}{\hbar v_T} \cdot \frac{1}{\beta \hbar \omega_0} \ll 1, \quad \frac{n}{N_c} \left(\frac{me^2}{\hbar^2 n^{1/3}} \right)^{3/2} \ll 1. \quad (23.1)$$

Формулы (23.1) написаны в гауссовой системе единиц. Основную роль играет первое неравенство; второе введено лишь для упрощения выкладок. Для большинства полупроводников неравенства (23.1) фактически выполняются в довольно широком интервале концентраций электронов и температуры. Напомним, что под e^2 следует понимать квадрат заряда, деленный на диэлектрическую проницаемость решетки. В гомеоплярных полупроводниках это обстоятельство может быть весьма существенно (у германия, например, $\epsilon = 16$). Заметим также, что в невырожденном газе по определению всегда

$$\frac{n}{N_c} \ll 1, \quad n^{(0)}(k) \ll 1. \quad (23.2)$$

В дальнейшем мы всюду, где возможно, будем пренебрегать левыми частями (23.2) по сравнению с правыми. Далее, первое из неравенств (23.1) можно переписать в виде

$$\frac{g^2}{\beta \hbar \omega_0} = \hbar \omega_0 \beta \ll 1. \quad (23.3)$$

Соответственно можно считать $\hbar \omega_0 < \frac{2}{\beta}$, чем мы и будем в дальнейшем пользоваться.

Общее выражение (9.5а) для фурье-образа массового оператора в нерелятивистском случае принимает вид

$$M(k) = -ie^2 \int dk' G_c(k') \Gamma(k', k) D_c(k' - k), \quad (23.4)$$

где $\Gamma(k', k)$ есть фурье-образ $\Gamma(x, y; z)$. В первом приближении мы имеем

$$M^{(0)}(k) = -ie^2 \int dk' G_c^{(0)}(k') D_c^{(0)}(k' - k). \quad (23.4a)$$

На основании (18.3) и (18.5) получаем

$$M^{(0)}(k) = -\frac{\beta\omega_0^2}{4(2\pi)^4} e^{-\frac{\beta k^2}{2m}} \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}} e^{\frac{\beta k^2}{2m} x}. \quad (23.5)$$

Таким образом, в первом исчезающем приближении массовый оператор оказывается вещественным (и, естественно, не зависит от k_0). Соответственно мнимая часть функции Грина (и, в силу (4.9), спектральная функция $J(k, E)$) сохраняет дельта-образный вид. На основании (23.5) и (11.1) мы имеем, пренебрегая величиной $n^{(0)}(k)$ по сравнению с единицей:

$$\text{Im } G_c(k, k_0) = \frac{1}{2(2\pi)^3} \delta[W(k) + (2\pi)^4 M^{(0)}(k) - k_0]. \quad (23.6)$$

Это означает, что в данном приближении взаимодействие приводит лишь к некоторому изменению («перенормировке») энергии носителя тока: последняя равна теперь

$$W_r(k) = W(k) + (2\pi)^4 M^{(0)}(k). \quad (23.7)$$

В то же время затухание квазичастиц отсутствует, и функция распределения их по импульсам не изменяет своего вида. Действительно, функция распределения дается формулой (5.7)

$$f(k) = 2(2\pi)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dk_0 \frac{\text{Im } G_c(k, k_0)}{e^{-\beta\mu + \beta k_0} - 1}. \quad (23.8)$$

Подставляя сюда значение $\text{Im } G_c(k, k_0)$ из (23.6), находим

$$f(k) = e^{\beta\mu - \beta W_r(k)}. \quad (23.9)$$

Как и должно быть, сюда входит именно «перенормированная» (т. е. наблюдаемая) энергия электрона $W_r(k)$.

Заметим, что правая часть (23.6) нигде не меняет знака. Так, конечно, и должно быть: в § 5 мы видели, что функция $\text{Im } G_c(k, k_0)$ меняет знак в точке $k_0 = \mu$; в силу дельта-образного характера (23.6) это возможно лишь, если уровень химического потенциала μ лежит в области значений $W_r(k)$. Последнее, однако, исключено, ибо принята аппроксимация Больцмана.

Из формулы (23.7) видно, что взаимодействие может изменить не только параметры энергетического спектра, но

и вид его: функция $W_r(k)$ — не квадратичная. При достаточно малых k , разлагая правую часть (23.5) в ряд, мы получаем

$$W_r(k) = \frac{k^2}{2m_r} - \frac{1}{2} \beta \omega_0^2, \quad (23.10)$$

где m_r — «перенормированная масса»:

$$m_r = m \left(1 + \frac{1}{3} \beta \omega_0^2 \right)^{-1}. \quad (23.11)$$

Второе слагаемое в правой части (23.10) дает перенормировку химического потенциала

$$\mu_r = \mu - W_r|_{k=0} = \mu + \frac{1}{2} \beta \omega_0^2. \quad (23.12)$$

В связи с вопросом об изменении электронного спектра следует обратить внимание на следующее обстоятельство. Формулы (23.7), (23.10) описывают изменение энергии электронов за счет, так сказать, непосредственного взаимодействия между ними. Мы знаем, однако, что, сверх того, взаимодействие приводит еще к экранированию внешнего поля, создаваемого какими-либо классическими источниками. (Действительно, массовый оператор входит в эффективное волновое уравнение (9.18) наряду с экранированным потенциалом $\tilde{\Phi}$, а не вместо него.) В частности, такими источниками являются регулярно расположенные атомы (или ионы) кристаллической решетки, создающие периодическое поле. При учете экранирования поле, конечно, остается периодическим, однако точная форма его изменяется, равно как изменяются и параметры, определяющие его величину. Это приводит к дополнительному изменению электронного спектра, не учитываемому формулами (23.7) и (23.10). Таким образом, последние, строго говоря, еще не дают полного решения задачи. В большинстве полупроводников, однако, это обстоятельство не существенно. Действительно, в гомеополярных полупроводниках типа германия силы взаимодействия атомов решетки с электронами короткодействующие, и экранирование при типичных (довольно больших) значениях радиуса экранирования мало влияет на них: из формулы (21.1) ясно видно, что функция $\rho(k)$ отлична от нуля лишь для волновых векторов, сравнимых с обратной величиной радиуса действия сил R ; при этом член с поляризационным оператором

ром в знаменателе оказывается малым — порядка $(\alpha R)^4$, где величина α дается формулой (21.12). В ионных полупроводниках это рассуждение, конечно, несправедливо, но там обычно концентрация свободных зарядов столь мала, что подробное рассмотрение эффектов экранирования вообще не представляет интереса для большинства задач.

Ситуация, описываемая формулой (23.6), весьма типична для приближенного метода § 11, коль скоро он применяется к ферми-системам с мгновенным взаимодействием. В первом неисчезающем приближении имеет место только тривиальное изменение спектра, и спектральная функция остается дельта-образной. В следующих приближениях, как мы сейчас увидим, появляются и более тонкие эффекты — затухание и изменение функции распределения; соответственно усложняется и аналитическая структура спектральной функции: вместо отдельных полюсов появляются точки ветвления на вещественной оси.

Поправки к массовому оператору (23.4) могут быть обусловлены;

1) заменой $G_c^{(0)}(k)$ на исправленное выражение, содержащее $M^{(0)}(k)$;

2) использованием более точного выражения для вершинной части;

3) заменой $D_c^{(0)}(k)$ более точной функцией $D_c(k)$, определяемой равенством (11.2).

Непосредственно видно, что поправки первого типа дают в M вклад порядка g^4 (и выше). Также обстоит дело и с поправками второго типа, в чем легко убедиться прямым расчетом: вычисляя поправку следующего приближения к Γ по образцу (9.16), видим, что $\Gamma = 1 + O(g^2)$. С другой стороны, замена $D_c^{(0)}(k)$ на $D_c(k)$ дает поправку уже порядка $|g|^3$. Действительно, в результате такой замены подынтегральное выражение (23.4) приобретает полюсы в точках $k_0 = \pm \omega_{pl}(k)$ (обходимые по обычному правилу); соответствующий вычет дает член порядка $g^2 \omega_{pl}$, т. е. порядка $|g|^3$. Таким образом, при выполнении условий (23.1) можно ограничиться лишь поправками третьего типа. Для упрощения расчета аппроксимируем плазменный спектр первым слагаемым в (18.28) и пренебрежем затуханием плазменных колебаний; мы видели в § 20, что в полупроводниках эта аппроксимация вполне

удовлетворительна. Тогда, выполняя интегрирование в (23.4) в области значений k , близких к тепловым, с принятой степенью точности легко находим

$$\operatorname{Re} M(k) \cong M^{(0)}(k), \quad (23.13)$$

$$\operatorname{Im} M(k) = -\frac{me^2\omega_0}{4|k|\hbar(2\pi)^5} \theta(k_0 + \omega_0) \ln \left| \frac{1 + \sqrt{2\alpha}}{1 - \sqrt{2\alpha}} \right|, \quad (23.14)$$

где

$$\alpha = \frac{\hbar m(k_0 + \omega_0)}{k^2}. \quad (23.15)$$

Формула (23.14), равно как и последующие равенства (23.18) — (23.21), написана в обычных гауссовых единицах. Заметим, что в силу (23.1) и (23.2) $\operatorname{Im} M(k) = 0$, если $k_0 = \mu$ (в принятой нормировке энергии $\mu < 0$). В интересующей нас области $\operatorname{Im} M(k) \neq 0$ и для мнимой части функции Грина получаем

$$\operatorname{Im} G_c(k) = -\frac{\operatorname{Im} M(k)}{[k_0 - W(k) - (2\pi)^4 \operatorname{Re} M(k)]^2 + [(2\pi)^4 \operatorname{Im} M(k)]^2}. \quad (23.16)$$

Соответственно легко найти функцию распределения носителей тока по импульсам, а также «множитель затухания» $\gamma(k)$. Введем параметр

$$(k) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{me^4\beta}{\hbar^2}} \frac{1}{kr_D} \ln \left| \frac{1 + \sqrt{1 + \frac{1}{3} \beta^2 \omega_0^2 \hbar^2 + \frac{\hbar \omega_0}{W(k)}}}{1 - \sqrt{1 + \frac{1}{3} \beta^2 \omega_0^2 \hbar^2 + \frac{\hbar \omega_0}{W(k)}}} \right|. \quad (23.17)$$

Следует обратить внимание на характер зависимости ρ от заряда: при $e^2 \rightarrow 0$ параметр ρ стремится к нулю, как $e^2 \ln e^2$. Пользуясь формулой (23.8), мы получаем

$$f(k) = e^{\beta\mu - \beta W_r(k)} \{1 + \varphi(k)\}. \quad (23.18)$$

Функция $\varphi(k)$, описывающая квантовые поправки к распределению Больцмана, дается равенством

$$\varphi(k) = -1 + \frac{1}{\pi} \left(\operatorname{ci} \rho \sin \rho - \operatorname{si} \rho \cos \rho + \int_0^{x_m} dx \frac{\rho e^x}{x^2 + \rho^2} \right), \quad (23.19)$$

$$x_m = \beta W(k)$$

где $\text{ci } \rho$ и $\text{si } \rho$ — интегральные косинус и синус. При $\rho \rightarrow 0$ (исчезновение взаимодействия) $\varphi(k) \rightarrow 0$, как это и должно быть. Для множителя затухания (вычисляемого по рецепту § 4) мы получаем на основании (23.16) и (23.14)

$$\gamma(k) = \frac{me^2\omega_0}{2k\hbar^2} \ln \left| \frac{k + \sqrt{2m[W_r(k) + \hbar\omega_0]}}{k - \sqrt{2m[W_r(k) + \hbar\omega_0]}} \right| \equiv \frac{\pi T}{\hbar} \rho. \quad (23.20)$$

В наиболее интересной области $k \sim \frac{\sqrt{m\pi T}}{\hbar}$ это дает

$$\gamma \simeq \frac{me^2\omega_0}{2k\hbar^2} \ln \frac{12}{\beta^2 \hbar^2 \omega_0^2}. \quad (23.21)$$

Заметим, что значение γ может оказаться и не слишком малым, несмотря на малость параметров (23.1).

Таким образом, использование спектральных теорем § 4, 5 в сочетании с «итерационной» теорией возмущений § 11 позволяет получить выражения, выходящие за пределы простых разложений по степеням константы связи. Аналогичная ситуация имеет место и в квантовой электродинамике (ср. [5]). На языке графического метода (см. приложение I) можно было бы сказать, что развитая методика сразу суммирует важнейшие диаграммы Фейнмана.

§ 24. Неидеальный металл¹⁾

В настоящем и следующем параграфах мы наметим один возможный путь решения третьей из поставленных ранее основных задач (см. § 17) — задачи о влиянии структурных дефектов того или иного типа на электронный энергетический спектр твердого тела. Спектр носителей тока в идеальной решетке при этом будем считать известным.

В металлах, очевидно, в настоящее время речь может идти только о качественном исследовании спектра. Действительно, в результате сильного экранирования (радиус экранирования $\sim k_F^{-1}$) существенную роль играют только поля на малых расстояниях от дефектов, а в этой области могут сказаться все (как правило, неизвестные) детали особенности структуры микрополей в кристалле. Имея в виду это

¹⁾ См. [6] и [7].

обстоятельство, мы рассмотрим простейшую модель, когда роль дефектов играют растворенные в решетке (или адсорбированные на поверхности) водородоподобные атомы. Задача состоит тогда в исследовании изменения энергии и электронной плотности системы при добавлении в нее одного электрона (с сохранением условия нейтральности). Как мы знаем, для этой цели достаточно найти однофермионную функцию Грина $G_c(x, x')$ в присутствии поля, создаваемого структурными дефектами. Полюсы ее определяют искомые изменения энергии, а предельная форма при $x'_0 \rightarrow x_0$ ($x'_0 > x_0$) дает матричные элементы «одночастичного» статистического оператора.

Для вычисления полюсов функции Грина мы воспользуемся эффективным волновым уравнением (9.18). В рассматриваемом случае оно принимает вид

$$W(-i\nabla_x)\chi(x) - \mu\chi(x) + \int dx' M(x - x'; E)\chi(x') + e\tilde{\varphi}(x)\chi(x) = E\chi(x), \quad (24.1)$$

где $\tilde{\varphi}(x)$ — потенциал поля, создаваемый структурными дефектами. Для простоты записи мы опускаем возможные матричные индексы у W , M и χ . Все содержание настоящего параграфа в равной мере относится и к случаю вырожденных зон.

Следует иметь в виду, что в зависимости от постановки задачи функция W может содержать еще аддитивную константу, связанную с энергией атома вдали от металла (так, например, обстоит дело в случае химической адсорбции). Наличие этой константы никак не влияет на дальнейшие рассуждения.

Как уже отмечалось в § 9, задача на собственные значения (24.1), вообще говоря, не эрмитовская: массовый оператор может иметь «неэрмитовскую» часть. Мы увидим, однако, что для наших целей особый интерес представляет случай $\text{Re } E \cong 0$ (поверхность Ферми). Как было показано в § 5, при этом мнимая часть однофермионной функции Грина (а следовательно, и мнимая часть массового оператора) обращается в нуль. Соответственно мы будем рассматривать (24.1) как обычную эрмитовскую задачу на

собственные значения, имея в виду, что получающиеся таким путем результаты, строго говоря, верны лишь при $E \rightarrow 0$.

Формально «эрмитизация» (24.1) достигается заменой $M(x, x'; E)$ на $M(x, x'; 0)$. При этом первые три слагаемых в левой части (24.1) можно объединить в один оператор W_r :

$$W_r \chi(x) = W(-i\nabla_x) \chi(x) - \mu \chi(x) + \int dx' M(x, x'; 0) \chi(x'), \quad (24.2)$$

и уравнение (24.1) принимает вид

$$W_r \chi(x) + e\tilde{\varphi}(x) \chi(x) = E \chi(x). \quad (24.3)$$

Оператор W_r интегральный или, что сводится к тому же, дифференциальный бесконечно высокого порядка. То же, однако, относится и к исходному оператору W , так что в этом смысле никаких новых трудностей не возникает. Очевидно, собственные значения W_r как раз и определяют спектр носителей тока в идеальной решетке (вблизи поверхности Ферми). В частности, форма поверхности Ферми (определяемая экспериментально) дается уравнением

$$W_r(k) \equiv W(k) + (2\pi)^4 M(k, 0) - \mu = 0, \quad (24.4)$$

где k — квазиволновой вектор носителя тока.

Рассмотрим сначала случай малой концентрации примеси, когда эффекты, производимые отдельными ее атомами, аддитивны, и потенциал в (24.3) можно связывать лишь с одним атомом. В рассматриваемом случае этот потенциал определяется формулами (21.1) и (21.2) при $Z=1$, причем конкретный вид поляризационного оператора для нас безразличен. Уравнение (24.3) при этом имеет, вообще говоря, два класса решений, соответствующих непрерывному и дискретному спектру. В первом случае влияние примесных атомов сводится лишь к некоторым незначительным изменениям в распределении электронной плотности, коль скоро концентрация дефектов достаточно мала. Никакой локализации электронов вблизи примесных центров при этом не происходит. Эти решения описывают обычную фермиевскую ветвь спектра в данном металле; соответствующие собственные значения при достаточно малой концентрации примеси даются

просто функцией $W_r(k)$ (с чем и связано утверждение о возможности экспериментального исследования ее вида).

Решения второго класса описывают неравномерное распределение электронов с максимумом вблизи структурного дефекта. В этом смысле соответствующие значения энергии можно назвать локальными уровнями¹⁾; следует лишь иметь в виду, что, как указывалось в § 9, это — не «одноэлектронные» уровни в буквальном смысле слова. Очевидно, эти состояния, если они существуют, энергетически выгоднее решений первого класса (если отсчитывать энергию от фермиевской, то в первом случае $E > 0$, а во втором $E < 0$). Крайне существенно, однако, что (независимо от характера аппроксимации) потенциал $\tilde{\varphi}$ в (24.3) всегда экранированный, с радиусом экранирования $\sim k_F^{-1}$ ($\sim 10^{-8}$ см, ибо речь идет о металле). Это означает, что в зависимости от параметров задачи решений второго класса может и не быть. В этом случае атомы, внедренные в решетку (или адсорбированные на ее поверхности), неизбежно ионизируются. Вопрос о наличии или отсутствии «локализованных» решений можно выяснить путем исследования уравнения (24.3) при $E \rightarrow 0$, и именно в этом смысле оправдана замена $M(x, x'; E)$ на $M(x, x'; 0)$.

Следует подчеркнуть, что общий вывод о возможности двух типов электронных состояний в неидеальном металле никак не связан со сделанным ранее специальным предположением о природе растворенной примеси. Существенно лишь, что мы имеем дело со структурными дефектами «локального» типа. В частности, изложенные соображения относятся и к энергетическому спектру не вполне упорядоченных сплавов, когда роль структурных дефектов играют нерегулярно расположенные атомы одной из компонент.

Растворение примеси, не создающей локальных уровней, приводит к увеличению концентрации свободных носителей тока. В том интервале температур, где доминирует рассея-

¹⁾ Они представляют собой многоэлектронный аналог локальных уровней стандартной одноэлектронной теории полупроводников. Во избежание недоразумений отметим, что наличие таких состояний ни в коей мере не противоречит принципу Паули, так как непрерывный спектр описывается, строго говоря, не плоскими волнами, а решениями уравнения (24.3).

ние на колебаниях решетки, это может привести к специфическому влиянию примеси на электропроводность вещества: последняя будет не уменьшаться, а слегка увеличиваться (пропорционально увеличению концентрации носителей).

Итак, все металлы по отношению к данному типу структурных микродефектов (или все микродефекты по отношению к данному металлу) можно разделить на два класса соответственно наличию или отсутствию локальных состояний.

Следует подчеркнуть, однако, что это деление на классы, определяясь параметрами задачи, отнюдь не носит абсолютного характера. При изменении концентрации электронов в металле (за счет изменения атомного состава сплава) возможен переход системы из одного класса в другой. На опыте это могло бы проявиться в изменении влияния примеси на электропроводность или, если речь идет об адсорбированных атомах, в специфической зависимости теплоты адсорбции от состава сплава — адсорбента.

Перейдем теперь к системам с большей концентрацией примеси, когда аддитивность эффектов, обусловленных отдельными атомами, заранее не очевидна. В этом случае функция $\tilde{\varphi}(x)$ представляет собой сумму экранированных потенциалов φ_a , и мы получаем задачу «молекулярного» типа. В наиболее интересном случае наличия локальных уровней будем, в соответствии с хорошо известной методикой квантовой химии, искать решение (24.3) в виде

$$\chi(x) = \sum_i c_i \chi_a(x - R_i), \quad (24.5)$$

где i — номер примесного атома, радиус-вектор которого есть R_i , c_i — коэффициенты, подлежащие вычислению, а $\chi_a(x - R_i)$ — собственная функция «атомной» задачи, вычисленная в пренебрежении в (24.3) потенциалами всех атомов, кроме i -го. Суммирование в правой части (24.5) производится по всем примесным атомам (или иным структурным дефектам «атомного» типа). Для коэффициентов c_i получается обычная система уравнений (E и E_a суть соответственно собственные значения «молекулярной» и «атомной» задач)

$$\sum_i c_i \{(E - E_a) S_{ik} + V_{ik}\} = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (24.6)$$

Здесь

$$S_{ik} = \int \bar{\chi}_a(x - R_k) \chi_a(x - R_l) dx, \quad (24.7)$$

$$V_{ik} = \sum_{j \neq i} \int \bar{\chi}_a(x - R_k) \tilde{\varphi}_a(x - R_j) \chi_a(x - R_l) dx. \quad (24.8)$$

Заранее ясно, что линейный размер «области локализации» функций χ_a порядка радиуса экранирования (или еще меньше). Как мы видели в § 21, на расстояниях, в несколько раз превышающих постоянную решетки, «атомный» потенциал с хорошей точностью дается формулами (21.6), (21.7), (21.15). Отсюда следует, что величины S_{ik} и V_{ik} при $i \neq k$ экспоненциально малы, т. е.

$$E = E_a \{1 + O(e^{-d/r_0})\}. \quad (24.9)$$

Здесь d представляет собой среднее расстояние между примесными атомами, r_0 , как всегда, — радиус экранирования.

Таким образом, концентрация примеси оказывается «достаточно малой» (в смысле принятого выше условия) практически всегда, когда вообще имеет смысл говорить о примеси в данном металле (очевидно, если среднее расстояние между примесными атомами приближается к постоянной решетки, то представление о микродефектах структуры вообще теряет смысл и следует говорить об образовании смешанной фазы). Причина этого совершенно ясна: влияние данного структурного дефекта ограничено окружающей его областью с линейными размерами порядка радиуса экранирования, т. е. (в металле) порядка постоянной решетки. В применении к теории химической адсорбции это означает, что в металле практически отсутствуют эффекты «граничного слоя» [8], [9]. Подчеркнем, однако, что речь идет здесь о металлах с идеально чистой поверхностью, в частности без полупроводниковой пленки. Наличие последней может совершенно исказить положение вещей.

Изложенные соображения позволяют немедленно распространить на металлы ряд качественных результатов, полученных ранее разными авторами в электронной теории хемосорбции и катализа на полупроводниках (см., например, обзор [10]). Так, если в данном металле возможно образование локальных состояний, то в применении к нему имеет смысл вся феноменологическая картина образования связей

адсорбата с адсорбентом. Следует, однако, обратить внимание на следующие обстоятельства:

Во-первых, речь идет о переносе на случай металла только некоторых феноменологических представлений электронной теории адсорбции и катализа на полупроводниках, но отнюдь не расчетных ее методов.

Во-вторых, статистика заполнения локальных уровней в данном случае оказывается гораздо более простой, чем в полупроводниках: благодаря большой концентрации собственных электронов в металле, уровень Ферми в нем практически фиксирован, и следовательно, характерные для полупроводников эффекты «взаимодействия через электронный газ» [11] здесь полностью отсутствуют. В этом смысле именно металл, а не полупроводник, весьма похож на классический адсорбент теории Лэнгмюра.

Подчеркнем, что во всех рассуждениях настоящего параграфа мы не вводили модельных аппроксимаций и не делали никаких предположений специального типа. Были использованы только два утверждения: о возможности поставить задачу в «квазиодночастичном» виде (24.1) и о сильно экранированном характере потенциала примеси, фигурирующего в (24.1). Первое, однако, есть общее следствие спектральных свойств функций Грина (§ 9), а второе вытекает хотя бы из соображений размерности.

§ 25. Мелкие локальные уровни в полупроводниках ¹⁾

Общий метод § 24, естественно, можно применить и к полупроводникам. Здесь, однако, имеются некоторые характерные особенности, позволяющие в ряде случаев улучшить и количественное решение задачи о локальных уровнях.

Во-первых, радиус экранирования в полупроводниках, как правило, весьма велик по сравнению с постоянной решетки независимо от того, определяется ли он формулой (21.7) или (21.12). Это позволяет при определенных условиях воспользоваться методом эффективной массы в одном из стандартных его вариантов, аппроксимируя функцию $W(k)$ выражением (18.22) (или соответствующим матричным

¹⁾ См. [12].

обобщением, см. § 22). Именно, так можно поступать в теории мелких, так называемых водородоподобных, локальных уровней, образуемых, например, примесями элементов третьей и пятой групп в германии и кремнии.

Во-вторых, как мы видели в § 23, в полупроводниках в довольно широком интервале значений концентрации носителей тока и температуры возможно явное вычисление массового оператора M ; при этом мнимая часть его действительно оказывается малой по сравнению с вещественной, и эрмитовская задача (24.3) приобретает смысл не только при $E = 0$. Обычная теория локальных уровней в полупроводниках получается из (24.3) в пренебрежении как массовым оператором, так и экранированием.

Учет экранирования в теории локальных уровней представляется существенным не только (и не столько) в чисто количественном, сколько в принципиальном отношении. Действительно, радиус экранирования в силу (21.7) и (21.12) зависит от концентрации свободных зарядов и от температуры. Последняя неявно входит и в выражение (21.12), ибо от нее зависит концентрация n . Это означает (в полном соответствии с общей дискуссией § 16), что энергия ионизации примеси в полупроводнике есть не чисто механическая, а термодинамическая величина. То же относится, очевидно, и к энергиям возбуждения (если кроме основного примесного уровня есть и возбужденные), к числу уровней, создаваемых данным структурным дефектом, и вообще ко всем без исключения характеристикам примесных состояний: они зависят от T и n , т. е. от положения уровня Ферми в кристалле (в частности, и от концентрации как данной, так и посторонней примеси). Таким образом, оказывается возможным, меняя значения T и n , в известной мере управлять энергетическим спектром полупроводника. При этом существенно, что в экранировке принимают участие не только равновесные, но и неравновесные носители тока. Действительно, время жизни последних определяется процессами рекомбинации, экранировка же, очевидно, устанавливается полностью, коль скоро достигается равновесное распределение свободных зарядов (при заданном общем их числе) и устанавливается статическое значение поля. Первый из названных процессов характеризуется временем свободного пробега, второй — максвелловским временем релаксации. Оба

эти параметра, как правило, на несколько порядков меньше рекомбинационного времени жизни, откуда и вытекает наше утверждение: неравновесные носители полностью успевают принять участие в экранировании до того, как они рекомбинируют. Это означает, что концентрацию экранирующих зарядов можно изменять независимо от концентрации примеси в образце — путем инъекции.

Подчеркнем, что в принципе оказывается возможным управлять не только расположением локальных уровней, но и общим их числом и даже самим фактом их существования: при достаточно малых значениях радиуса экранирования локальные электронные состояния могут исчезнуть вообще (ср. § 24). Экспериментально исчезновение возбужденных и основного локальных уровней могло бы проявиться, например, в исчезновении примесного инфракрасного поглощения при изменении концентрации свободных носителей тока.

Для оценки соответствующих критических значений T и n необходимо явно решить уравнение (24.3) в том или ином конкретном случае. Мы рассмотрим здесь простейший вариант «водородоподобной» модели, считая зоны невырожденными, пренебрегая анизотропией тензора эффективной массы и рассматривая остов примесного атома просто как точечный заряд. Такая постановка задачи является, разумеется, довольно приближенной; по этой причине нет смысла учитывать (сравнительно малые) поправки на массовый оператор в (24.3). В качестве потенциала примеси $\varphi(\tilde{x})$ мы возьмем здесь выражение (21.12). Действительно, наибольший интерес в рассматриваемой задаче, очевидно, представляют расстояния порядка радиуса боровской орбиты в кристалле $\hbar^2/me^2$; последние — при типичных значениях эффективной массы и диэлектрической проницаемости — как правило, заметно меньше средней длины волны де-Бройля.

Таким образом, задача свелась к решению обычного уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \chi - \frac{e^2}{r} e^{-\alpha r} \cos(\alpha r) \chi = \lambda \chi. \quad (25.1)$$

Собственное значение λ отличается от E выбором начала отсчета энергии: в уравнении (25.1) энергия отсчитывается от дна зоны проводимости, и следовательно, абсолютное значение энергии низшего уровня $|\lambda_{\min}|$ есть непосредственно

энергия ионизации J . Для определенности мы рассматриваем здесь, как и всегда в этой книге, случай электронного полупроводника. Перенос результатов на случай дырочного образца (в рамках сделанных предположений) требует лишь очевидного изменения обозначений.

При малых значениях α (слабое экранирование) можно воспользоваться стандартной теорией возмущений, выбрав в качестве невозмущенной задачи уравнение типа (25.1) с чисто кулоновским потенциалом взаимодействия (очевидно, это есть не что иное, как рассматриваемый в стандартной теории случай весьма малой концентрации носителей, когда экранирование не играет роли). В первом приближении мы получаем для уменьшения энергии ионизации по сравнению с чисто «водородным» случаем (в гауссовых единицах)

$$\Delta J = \hbar\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi ne^2 \hbar^2}{m}}. \quad (25.2)$$

Как уже указывалось, зависимость энергии ионизации от концентрации электронов влечет за собой и соответствующую зависимость ее от концентрации примеси. Последнее обстоятельство давно уже было обнаружено на опыте (см., например, [13]). Следует, однако, иметь в виду, что эта зависимость может быть обусловлена целым рядом различных причин, не обязательно связанных с экранированием; поэтому сопоставление следствий из формулы (25.9) с опытом пока еще преждевременно.

По смыслу теории возмущений формулой (25.2) можно пользоваться лишь пока величина $\Delta J/J$ достаточно мала. При более сильном экранировании уравнение (25.1) следует решать численно. Подробное описание методики расчета можно найти в работе [7]. Мы приведем здесь только критическое значение концентрации n_c , при которой энергия ионизации обращается в нуль:

$$n_c = \frac{8}{3\pi^2} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^3. \quad (25.3)$$

Множитель $8/3\pi^2$ возник в связи с переходом от системы обозначений [7] к принятой в этой книге.

Отметим в заключение, что возможность исчезновения локальных уровней заставляет вновь переоценить основанную на этой идее теорию металлической проводимости полу-

проводников [14], отвергнутую в свое время именно в силу аргументов, связанных с кулоновским характером потенциала примеси. (Этим, конечно, отнюдь не дискредитируется другое возможное объяснение металлической проводимости, основанное на представлении о примесной зоне [15].)

§ 26. Константа взаимодействия электронов с фононами в металле¹⁾

Одно из возможных применений развитой в § 21 общей теории экранирования составляет задача о константе взаимодействия носителей тока с фононами в металле. Действительно, это взаимодействие есть в основном не что иное, как взаимодействие электронов с дополнительным электрическим полем, возникающим при смещении ионов решетки из положений равновесия²⁾. Именно так и была поставлена задача в работах [17]—[19]. Проблема состоит здесь только в должном учете экранирования поля свободными зарядами.

В цитированных работах эффект экранирования учитывался либо по способу Томаса—Ферми, либо в приближении самосогласованного поля, либо, наконец, с помощью метода дополнительных переменных. Однако первый способ в применении к твердому телу вызывает серьезные сомнения в силу своей квазиклассичности; приближение самосогласованного поля в металлах также связано с рядом математических трудностей (см., например, [20]); наконец, учет экранирования в методе дополнительных переменных, как показано в § 21, является лишь приближенным. Мы увидим, что метод функций Грина позволяет дать в принципе точное решение задачи, коль скоро известен закон дисперсии носителей тока в идеальной решетке.

Рассмотрим для простоты решетку с одним атомом в элементарной ячейке. Интересуясь только длинными волнами, можно считать ионы точечными.

Обозначим вектор смещения иона из положения равновесия через $u(x)$. Дополнительная плотность заряда,

¹⁾ См. [16].

²⁾ Есть еще поправки магнитного типа [17], но они, очевидно, гораздо менее существенны.

возникающая при таком смещении, есть

$$\delta\rho = Ne \operatorname{div} \mathbf{u}, \quad (26.1)$$

где N — концентрация ионов. Данному значению $\delta\rho$ соответствует дополнительная потенциальная энергия электронов

$$U = -e\tilde{\varphi}, \quad (26.2)$$

где экранированный потенциал $\tilde{\varphi}$ дается формулой (21.1). Подчеркнем, что мы не делаем здесь никаких предположений о виде поляризационного оператора. Аппроксимация $\Gamma=1$ в области длинных волн решетки оправдана, ибо означает лишь пренебрежение небольшой «размазкой» электрона.

Для вектора смещения воспользуемся обычным выражением:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}, \nu} [2d\omega(\mathbf{k}, \nu)V]^{-1/2} \{ \varepsilon(\mathbf{k}, \nu) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t} \xi(\mathbf{k}, \nu) + \text{э.м. сопряж.} \}. \quad (26.3)$$

Здесь V — фундаментальный объем, d — плотность кристалла, $\mathbf{k}$ и ω — волновой вектор и частота фонона, $\nu=1, 2, 3$ — номер колебаний ($\nu=1$ соответствует продольным волнам), $\varepsilon(\mathbf{k}, \nu)$ — орт смещения, ξ и $\bar{\xi}$ — бозе-операторы рождения и уничтожения фононов. Подставляя (26.3) в (26.1) и принимая во внимание (11.2), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{u} = & -\frac{iNe^2}{V\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\mathbf{k}|}{V2d\omega(\mathbf{k}, 1)} \cdot \frac{1}{k^2 - (2\pi)^4 \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega(\mathbf{k})) + i\varepsilon} \times \\ & \times \{ e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega(\mathbf{k}, 1)x_0} \xi(\mathbf{k}, 1) - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x} + i\omega(\mathbf{k}, 1)x_0} \bar{\xi}(\mathbf{k}, 1) \}. \end{aligned} \quad (26.4)$$

Как мы знаем (§ 18), вещественные корни уравнения

$$k^2 - (2\pi)^4 \mathcal{P}(\mathbf{k}, \omega) = 0$$

связаны с плазменными волнами. Частоты последних в металле гораздо больше звуковых, и, следовательно, знаменатель в (26.4) в нуль не обращается. Более того, поскольку энергии фононов малы по сравнению с фермиевской, поляризационный оператор можно заменить его значением при $\omega=0$. (Мы видели в § 11, что фактически в $\mathcal{P}$ входит лишь отношение ω/μ , но не эти величины порознь.)

Далее, в области длинных волн (единственно интересной, например, в теории электропроводности) можно пренебречь величиной k^2 по сравнению с $|\mathcal{P}(k, 0)|$, а спектр фононов считать дебаевским: $\omega(k, 1) = ck$; таким образом, принимая во внимание (21.14), окончательно получаем стандартную формулу¹⁾

$$u = -iG \sum_k \sqrt{\frac{2\omega(k, 1)}{V}} \{e^{ikx - i\omega(k)x_0} \xi(k, 1) - \text{эрм. сопряж.}\}, \quad (26.5)$$

где безразмерная константа связи G (в обычных гауссовых единицах) дается выражением

$$G = \frac{(2\pi)^3 N \hbar \sqrt{z}}{\sqrt{M \mu} cb}. \quad (26.6)$$

Здесь z есть эффективное число электронов на атом, M — масса иона решетки, а μ — энергия Ферми. В частности, в обычно используемой в задачах о взаимодействии электронов с фононами квадратичной изотропной аппроксимации мы получаем

$$G = \frac{\sqrt{2}}{z^{1/6}} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3} \frac{\hbar}{mc} N^{1/3} \left(\frac{m}{M}\right)^{1/2}. \quad (26.7)$$

Эта величина, по-видимому, составляет около 0,3 — 0,4.

Заметим, что в формулу (26.6) входит только значение поляризационного оператора при $k_0 = k = 0$. Как было показано в § 11, эту величину можно вычислить весьма точно. Таким образом, возможная неточность выражения (26.7) может быть связана не с учетом экранирования, а лишь с законом дисперсии фононов или носителей тока. В реальном металле последний бесспорно не укладывается в простую квадратичную аппроксимацию (тем более изотропную), а имеет гораздо более сложный вид. В связи с этим полезно указать на связь константы G с радиусом экранирования статического поля свободными зарядами. На основании (21.15) мы имеем (при любом законе дисперсии

¹⁾ Подчеркнем, что все эти аппроксимации по существу не нужны и приняты лишь из соображений соответствия с обычно используемым выражением.

электронов)

$$G = \frac{4\pi N \sqrt{ze^2 r_0^2}}{\sqrt{M\mu c}}. \quad (26.8)$$

Причина этой связи совершенно очевидна: в силу малости фононных частот по сравнению с фермиевской дополнительное поле, связанное с колебаниями решетки, действует на носители тока практически как статическое.

Нелишне обратить внимание на то, что в рамках развитой здесь методики вывод формулы (26.8) носит почти тривиальный характер. Это (равно как и содержание § 24) иллюстрирует возможности полуфеноменологического подхода в рамках метода функций Грина.

ГЛАВА VI

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С ФОНОНАМИ

§ 27. Теория возмущений ¹⁾

Взаимодействие носителей тока с колебаниями кристаллической решетки до сравнительно недавнего времени рассматривалось лишь в связи с теорией неравновесных процессов типа электропроводности. Предполагалось, что энергетический спектр носителей тока «формируется» под влиянием сильного взаимодействия их с полем идеальной решетки и, может быть, друг с другом; роль же колебаний решетки состоит лишь в том, что они обуславливают сравнительно редкие переходы между состояниями электронов в идеальном кристалле. Постепенно, однако, выяснилось, что в ряде случаев такая постановка вопроса недостаточна, и взаимодействие с фононами надо явно принимать во внимание уже при определении энергетического спектра системы.

Во-первых, в ряде кристаллов это взаимодействие ни в каком смысле не мало [3] — [6]. Учет его уже при вычислении энергетического спектра системы привел к представлению о специальном типе носителей тока в ионных кристаллах — электронах, движущихся совместно с созданной ими инерционной поляризацией решетки. Элементарные возбуждения этого типа получили название поляронов [6].

Во-вторых, выяснилось, что в металле взаимодействие электронов с фононами, даже будучи сравнительно слабым, может привести к радикальному изменению спектра носителей тока: именно оно обуславливает сверхпроводимость

¹⁾ См. [1], [2].

электронов)

$$G = \frac{4\pi N \sqrt{ze^2 r_0^2}}{\sqrt{M\mu} c}. \quad (26.8)$$

Причина этой связи совершенно очевидна: в силу малости фоновых частот по сравнению с фермиевской дополнительное поле, связанное с колебаниями решетки, действует на носители тока практически как статическое.

Нелишне обратить внимание на то, что в рамках развитой здесь методики вывод формулы (26.8) носит почти тривиальный характер. Это (равно как и содержание § 24) иллюстрирует возможности полуфеноменологического подхода в рамках метода функций Грина.

ГЛАВА VI

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С ФОНОНАМИ

§ 27. Теория возмущений¹⁾

Взаимодействие носителей тока с колебаниями кристаллической решетки до сравнительно недавнего времени рассматривалось лишь в связи с теорией неравновесных процессов типа электропроводности. Предполагалось, что энергетический спектр носителей тока «формируется» под влиянием сильного взаимодействия их с полем идеальной решетки и, может быть, друг с другом; роль же колебаний решетки состоит лишь в том, что они обуславливают сравнительно редкие переходы между состояниями электронов в идеальном кристалле. Постепенно, однако, выяснилось, что в ряде случаев такая постановка вопроса недостаточна, и взаимодействие с фононами надо явно принимать во внимание уже при определении энергетического спектра системы.

Во-первых, в ряде кристаллов это взаимодействие ни в каком смысле не мало [3]—[6]. Учет его уже при вычислении энергетического спектра системы привел к представлению о специальном типе носителей тока в ионных кристаллах—электронах, движущихся совместно с созданной ими инерционной поляризацией решетки. Элементарные возбуждения этого типа получили название поляронов [6].

Во-вторых, выяснилось, что в металле взаимодействие электронов с фононами, даже будучи сравнительно слабым, может привести к радикальному изменению спектра носителей тока: именно оно обуславливает сверхпроводимость

¹⁾ См. [1], [2].

[7]—[9]. Этот случай весьма интересен и с чисто методической точки зрения: мы имеем здесь очень ясный пример того, как даже слабое взаимодействие фермионов с квантовым полем приводит к эффектам, принципиально не укладывающимся в рамки теории возмущений и описываемым неаналитическими функциями константы связи.

В-третьих, выяснилось [10]—[12], что взаимодействие электронов с фононами в гомеополярных полупроводниках приводит к температурной зависимости ширины запрещенной зоны, энергии ионизации локальных уровней и т. д. (хотя, может быть, и не объясняет всю эту зависимость).

В настоящем параграфе мы исследуем взаимодействие электронов с акустическими фононами в рамках теории возмущений § 11 (без группы перенормировки). Это приближение не учитывает эффектов сверхпроводимости, однако, для некоторых задач оно достаточно.

Мы примем простейшую изотропную аппроксимацию для невозмущенного спектра электронов, полагая

$$W(p) = \frac{p^2}{2m}. \quad (27.1)$$

Соответственно будем считать изотропным и взаимодействие электронов с фононами, описывая его гамильтонианом (6.17) с полевой функцией (6.16).

Вычислим прежде всего функцию Грина для свободного фононного поля $D_c^{(0)}(k)$ ¹⁾. Обозначим через $\nu(k)$ среднее (по невозмущенному ансамблю) число фононов²⁾ с квази-волновым вектором k :

$$\nu(k) = \langle \bar{\xi}(k) \xi(k) \rangle_0.$$

Частоту фононов, как и в § 6, обозначим через $\omega(k)$. Очевидно,

$$\nu(k) = \frac{1}{e^{\beta\omega(k)} - 1}. \quad (27.2)$$

¹⁾ В настоящей главе мы не рассматриваем эффектов, связанных с кулоновским взаимодействием; поэтому использование для фононной функции Грина того же обозначения, что и для фотонной в гл. IV, не может повести к недоразумениям.

²⁾ В соответствии с постановкой задачи речь идет о фононах продольной акустической ветви.

Заметим, что $\omega(\mathbf{k})$ есть четная функция. В дальнейшем при малых волновых числах мы будем пользоваться изотропной аппроксимацией Дебая

$$\omega(\mathbf{k}) = ck, \quad k = |\mathbf{k}|. \quad (27.3)$$

Константа c есть «затравочная» скорость звука — та, которая наблюдалась бы в отсутствие взаимодействия с носителями тока. На основании (6.16) и (7.11) мы получаем

$$\begin{aligned} D_c^{(0)}(x, x') &= -i \langle T \{ \Phi(x) \Phi(x') \} \rangle = \\ &= -\frac{i}{2(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{k^2}{\omega(\mathbf{k})} e^{i(\mathbf{k}, x-x')} \left\{ [v(\mathbf{k}) + 1] e^{-i\omega(\mathbf{k})|x_0-x'_0|} + \right. \\ &\quad \left. + v(\mathbf{k}) e^{i\omega(\mathbf{k})|x_0-x'_0|} \right\}. \end{aligned} \quad (27.4)$$

Интеграл здесь берется по первой (фононной) зоне Бриллюэна. В дальнейшем мы будем отмечать это обстоятельство чертой сверху над знаком интеграла по $\mathbf{k}$. Удобно выразить $D_c^{(0)}(x, x')$ в виде четырехмерного интеграла Фурье. Для этой цели воспользуемся соотношением, справедливость которого легко проверить непосредственно:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk_0 \frac{e^{-ik_0(x_0-x'_0)}}{k_0^2 - \omega^2(\mathbf{k}) \pm i\varepsilon} = \mp \frac{\pi i}{\omega(\mathbf{k})} e^{\mp i\omega(\mathbf{k})|x_0-x'_0|}. \quad (27.5)$$

На основании (27.5) выражение (27.4) можно переписать в виде

$$D_c^{(0)}(x, x') = \int \overline{d\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}, x-x')} D_c^{(0)}(\mathbf{k}), \quad (27.6)$$

$$D_c^{(0)}(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{(2\pi)^4} \frac{k_0^2 - \omega^2(\mathbf{k}) - i\varepsilon [2v(\mathbf{k}) + 1]}{[k_0^2 - \omega^2(\mathbf{k})]^2 + \varepsilon^2}. \quad (27.7)$$

В частности,

$$\text{Im } D_c^{(0)}(\mathbf{k}) = -\frac{k^2}{(2\pi)^4} [2v(\mathbf{k}) + 1] \delta[k_0^2 - \omega^2(\mathbf{k})]. \quad (27.8)$$

Как и должно быть (ср. § 4), эта функция имеет дельта-образные особенности в точках $|k_0| = \omega(\mathbf{k})$.

Невозмущенную одноэлектронную функцию Грина по-прежнему возьмем в виде (5.20). Это означает, в частности, что мы рассматриваем носители тока лишь в одной зоне.

Поляризационный оператор такой системы в первом неисчезающем приближении по константе связи имеет тот же вид, что и в гл. IV: в полученных там выражениях надо лишь заменить заряд электрона e константой связи g . Последняя для металлов получена в § 26, а для гомеополярных полупроводников дается выражением

$$g = E_c^{(1)} \sqrt{\frac{\hbar}{d}},$$

где d — плотность кристалла, а $E_c^{(1)}$ — константа потенциала деформации (см. [23], [24]).

Таким образом, для фоновой функции Грина с учетом взаимодействия с электронами мы получаем в силу (11.2)

$$D_c(k) = \frac{k^2}{(2\pi)^4} \times \\ \times \frac{k_0^2 - \omega^2(k) - i\varepsilon [2\nu(k) + 1]}{[k_0^2 - \omega^2(k)]^2 + \varepsilon^2 - (2\pi)^4 k^2 \mathcal{P}^{(0)}(k) [k_0^2 - \omega^2(k) - i\varepsilon (2\nu + 1)]}. \quad (27.9)$$

Вещественная часть поляризационного оператора при вещественных $k_0 \equiv \omega'$ дается формулой

$$\text{Re } \mathcal{P}^{(0)}(k, k_0) = \\ = \frac{2mg^2}{(2\pi)^6 k} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' k' n^{(0)}(k') \mathcal{P} \ln \left| \frac{(k' - k/2)^2 - \frac{m^2 k_0^2}{k^2}}{(k' + \frac{k}{2})^2 - \frac{m^2 k_0^2}{k^2}} \right|. \quad (27.10)$$

Для мнимой части находим

$$\text{Im } \mathcal{P}^{(0)}(k, k_0) = \frac{ng^2 \sqrt{2\beta m}}{8(2\pi)^3 k F_{1/2}(\beta\mu)} \times \\ \times \ln \frac{1 + \exp \left\{ \beta\mu - \frac{\beta k^2}{8m} \left(1 - \frac{2m\omega'}{k^2} \right)^2 \right\}}{1 + \exp \left\{ \beta\mu - \frac{\beta k^2}{8m} \left(1 + \frac{2m\omega'}{k^2} \right)^2 \right\}}, \quad (27.11)$$

где

$$F_\alpha(\beta\mu) = \int_0^\infty \frac{x^\alpha dx}{e^{x-\beta\mu} + 1}; \quad k_0 = \omega' - i\gamma, \quad \gamma \rightarrow 0 \quad \gamma > 0.$$

Если система не полностью вырождена, то, как мы знаем, правая часть (27.11) отлична от нуля при любых k , и в (27.9) можно сразу совершить предельный переход: $\varepsilon \rightarrow 0$.

Исследование спектра фононов, взаимодействующих с электронами, производится в принципе так же, как и исследование плазменного спектра в §§ 18—22. Предполагая затухание фононов достаточно малым, получаем дисперсионное уравнение для определения частот ($k_0 \in \text{Re}$)

$$k_0^2 - \omega^2(k) - (2\pi)^4 k^2 \text{Re } \mathcal{P}^{(0)}(k, k_0) = 0. \quad (27.12)$$

Ограничимся областью малых k и воспользуемся аппроксимацией (27.3). Исследование показывает, что, в отличие от (18.7), уравнение (27.12) не имеет корней $k_0(k)$, остающихся конечными при $k \rightarrow 0$. Так, конечно, и должно было получиться: спектр реальных акустических фононов должен начинаться от нуля. То же самое получилось бы и при более сложной зависимости $\omega(k)$; существенно лишь условие $\omega(k) \rightarrow 0$ при $k \rightarrow 0$. В соответствии с этим положим

$$k_0^2(k) = c_r^2 k^2, \quad (27.13)$$

где c_r — «перенормированная» (т. е. фактически наблюдаемая) скорость звука. Тогда при малых k правая часть (27.10) стремится к некоторой константе

$$\lim_{\substack{k \rightarrow 0 \\ k_0 = c_r k}} \text{Re } \mathcal{P}(k, k_0) = -\frac{4mg^2}{(2\pi)^6} \int_0^\infty \mathcal{P} \frac{k'^2 dk'}{k'^2 - m^2 c_r^2} n^{(0)}(k'), \quad (27.14)$$

что и доказывает справедливость предположения (27.13). Подставляя (27.13) и (27.14) в (27.12), получаем уравнение для определения наблюдаемой скорости звука при любой степени вырождения электронного газа:

$$c_r^2 + \frac{mg^2}{\pi^2} \int_0^\infty \mathcal{P} \frac{k'^2 n^{(0)}(k') dk'}{k'^2 - m^2 c_r^2} = c^2. \quad (27.15)$$

Интеграл в левой части (27.15) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \mathcal{P} \frac{k'^2 n^{(0)}(k') dk'}{k'^2 - m^2 c_r^2} &= \\ &= \int_0^{\infty} n^{(0)}(k') dk' + m^2 c_r^2 \int_0^{\infty} \mathcal{P} \frac{n^{(0)}(k') dk'}{k'^2 - m^2 c_r^2}. \end{aligned}$$

Как правило, величина mc_r весьма мала по сравнению с характерными импульсами электронов. Поэтому второе слагаемое здесь можно отбросить, и тогда уравнение (27.15) сразу дает искомую скорость звука

$$c_r^2 = c^2 - \frac{m^{3/2} g^2}{\pi^2 \sqrt{2\beta}} F_{-1/2}(\beta\mu). \quad (27.16)$$

Непосредственный расчет для невырожденного и полностью вырожденного газов показывает, что в первом случае при этом совершается ошибка порядка βmc_r^2 , а во втором — порядка $(mc_r k_F^{-1})^2$. Обе эти величины в обычных условиях совершенно ничтожны.

Для невырожденного электронного газа формула (27.16) принимает вид (в обычных единицах)

$$c_r^2 = c^2 - n\beta g^2 = c^2 - n\beta \frac{(E_c^{(1)})^2}{d}. \quad (27.17)$$

Таким образом, скорость звука оказывается линейно зависящей от концентрации носителей тока n .

Заметим, что величины, стоящие в правых частях (27.16) и (27.17), не являются положительно определенными при произвольном значении константы связи. С другой стороны, величина c_r по определению должна быть вещественной (противное означало бы, что дисперсионное уравнение (27.12) не имеет вещественных корней вида (27.13), т. е. в решетке не может распространяться звук обычного типа). Это обстоятельство накладывает формальное ограничение на возмож-

ные значения константы связи. Надо заметить, однако, что формулы (27.16) и (27.17) получены в рамках теории возмущений, и заранее неясно, можно ли применять их в области, где поправка к c^2 сравнима с самой этой величиной. Для окончательного решения этого вопроса следовало бы воспользоваться группой перенормировки подобно тому, как это было сделано в гл. IV при определении плазменных частот. Мы не будем здесь останавливаться на этом; заметим лишь, что вопрос о предельном значении g^2 в металле исследовался разными методами рядом авторов (см., например, [13] — [15]). В работе [15] существование верхней границы g^2 установлено в адиабатическом приближении.

Легко вычислить также «множитель затухания» фононов (считая его малым). Поступая по образцу § 20, мы получаем

$$\gamma = \left| \frac{(2\pi)^4 k^2 \lim_{\gamma \rightarrow +0} \operatorname{Im} \mathcal{S}^{(0)}(k, \omega' - i\gamma)}{2\omega'(k) - (2\pi)^4 k^2 \frac{\partial \operatorname{Re} \mathcal{S}^{(0)}(k)}{\partial k_0} \Big|_{k_0 = \omega'}} \right|. \quad (27.18)$$

В качестве ω' сюда следует подставить решение дисперсионного уравнения (27.12). В частности, при малых k имеем $\omega' = c_r k$. В этом случае главную роль в знаменателе играет первое слагаемое; принимая во внимание (27.11), находим

$$\gamma(k) \cong \frac{ng^2 \sqrt{2\beta m}}{8c_r F_{1/2}(\beta\mu)} \ln \frac{1 + e^{\beta\mu + \frac{1}{2}\beta\omega' - \frac{\beta k^2}{2m}}}{1 + e^{\beta\mu - \frac{1}{2}\beta\omega' - \frac{\beta k^2}{2m}}}. \quad (27.19)$$

Малые члены порядка βmc_r^2 здесь отброшены. При $\beta \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$) выражение (27.19) переходит в формулу, полученную в работе [22].

Обратимся теперь к фермиевской ветви спектра. Для массового оператора мы имеем в силу (11.3) и (6.18)

$$M^{(0)}(k) = -ig^2 \int \bar{dk}' G_c^{(0)}(k+k') D_c^{(0)}(k'). \quad (27.20)$$

Подставим сюда выражения (5.20) и (27.7) и проинтегрируем по k'_0 (в соответствии с правилом (5.5) контур интегриро-

вания следует замыкать в верхней полуплоскости). В результате получаем

$$M^{(0)}(k) = -\frac{g^2}{(2\pi)^7} \int \bar{dk}' k'^2 \left\{ n^{(0)}(k+k') \times \right. \\ \times \frac{[k_0 - W(k+k')]^2 - \omega^2(k') - i\varepsilon [2\nu(k') + 1]}{\{[k_0 - W(k+k')]^2 - \omega^2(k')\}^2 + \varepsilon^2} - \\ - \frac{\nu(k')}{2\omega(k')} \cdot \frac{\omega(k') + k_0 - W(k+k') + i\eta [2n^{(0)}(k+k') - 1]}{[\omega(k') + k_0 - W(k+k')]^2 + \eta^2} - \\ \left. - \frac{\nu(k') + 1}{2\omega(k')} \cdot \frac{-\omega(k') + k_0 - W(k+k') + i\eta [2n^{(0)}(k+k') - 1]}{[-\omega(k') + k_0 - W(k+k')]^2 + \eta^2} \right\}. \quad (27.21)$$

В дальнейшем нас будет интересоваться либо вещественная часть массового оператора при вещественных значениях k_0 , либо мнимая его часть при $k_0 = \omega' - i\gamma$, $\gamma \ll \omega'$. Поступая так же, как и в § 23, мы получаем

$$\text{Re } M^{(0)}(k, k_0 = \omega') = \\ = -\frac{g^2}{(2\pi)^7} \int \bar{dk}' k'^2 \mathcal{P} \left\{ \frac{n^{(0)}(k+k')}{[k_0 - W(k+k')]^2 - \omega^2(k')} - \right. \\ \left. - \frac{\nu(k')}{2\omega(k') [\omega(k') + k_0 - W(k+k')]} - \right. \\ \left. - \frac{\nu(k') + 1}{2\omega(k') [-\omega(k') + k_0 - W(k+k')]} \right\}, \quad (27.22)$$

$$\lim_{\substack{\gamma \rightarrow 0 \\ \gamma > 0}} \text{Im } M^{(0)}(k, k_0 = \omega' - i\gamma) = \frac{g^2}{4(2\pi)^6} \int \bar{dk}' \frac{k'^2}{\omega(k')} \times \\ \times \{ [\nu(k') + n^{(0)}(k+k')] \delta[\omega' + \omega(k') - W(k+k')] + \\ + [\nu(k') + 1 - n^{(0)}(k+k')] \delta[\omega' - \omega(k') - W(k+k')] \}. \quad (27.23)$$

В случае статистики Больцмана интеграл в (27.23) легко вычисляется до конца. Поскольку основной вклад в интеграл дает область сравнительно малых волновых чисел, можно воспользоваться аппроксимацией (27.3); видно также, что в существенной области $\nu(k) \gg 1 \gg n^{(0)}(k)$ и $\omega(k) \ll W(k)$ (столкновения почти упругие). Тогда, пренебрегая величинами порядка βmc^2 , мы получаем

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0, \gamma > 0} \text{Im } M^{(0)}(k, k_0 = \omega' - i\gamma) \approx \frac{mg^2 \sqrt{2m\omega'}}{(2\pi)^5 \beta c^2} \delta(\omega'). \quad (27.24)$$

Формулы (27.21) — (27.24) позволяют исследовать влияние взаимодействия электронов с фононами на различные характеристики системы электронов и фононов, как равновесные, так и неравновесные.

§ 28. Энергетический спектр сверхпроводника¹⁾

До сих пор мы проводили все конкретные вычисления в рамках теории возмущений § 11. В настоящем параграфе будет рассмотрен важнейший пример, в котором такая трактовка невозможна, и функция Грина, рассматриваемая в зависимости от константы связи g , имеет существенно особую точку при $g \rightarrow 0$. Мы имеем в виду задачу об энергетическом спектре сверхпроводника в модели Бардина, в которой взаимодействие электронов с фононным полем заменяется специальным видом прямого взаимодействия между электронами (см. § 6). На основании (6.5) и (6.15) гамильтониан данной задачи имеет вид

$$H' = H'_p + H_{\text{int}}, \quad (28.1)$$

$$H'_p = \sum_{\lambda} \{T(\lambda) - \mu\} \bar{a}(\lambda) a(\lambda), \quad (28.2)$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\lambda, \lambda' \\ (\lambda \neq \lambda')}} B(\lambda, \lambda') \bar{a}(\lambda) \bar{a}(-\lambda) a(-\lambda') a(\lambda'). \quad (28.3)$$

Заметим, что формально к такому же виду можно привести и гамильтонианы некоторых других систем. Помимо конкретного приложения к теории сверхпроводимости, гамильтониан (28.1) — (28.3) представляет и самостоятельный интерес, поскольку он допускает асимптотически точную диагонализацию [19]. В данном случае символ λ обозначает совокупность трех компонент импульса p и спиновой координаты σ ($\lambda = \{p, \sigma\}$; $-\lambda = \{-p, -\sigma\}$), $T(\lambda) = T(p) = \frac{p^2}{2m}$. Функция $B(\lambda, \lambda')$ обладает следующими свойствами:

$$B(\lambda, \lambda') = -B(\lambda, -\lambda'); B_s(\lambda, \lambda') = B(\lambda', \lambda) < 0. \quad (28.4)$$

¹⁾ См. [16] — [18].

Сведение электронно-фононного взаимодействия к некоторому эквивалентному электрон-электронному эффективно можно сделать лишь для электронов, лежащих в тонком слое вблизи поверхности Ферми. В соответствии с этим функция $B(\lambda, \lambda')$ должна заметно отличаться от нуля лишь в этом слое. (В собственно модели Бардина считается, что она равна константе в слое толщины $2\omega_0$ около поверхности Ферми и равна нулю вне его.)

В этом параграфе мы обратимся к непосредственному решению цепочки уравнений типа (7.7), расцепляя ее с помощью асимптотически точного приема. Введем функции Грина

$$G(\lambda, x_0 - x'_0) = \langle \langle a(\lambda, x_0) | \bar{a}(\lambda, x'_0) \rangle \rangle^{(+)}, \quad (28.5)$$

$$G_2(\lambda, \lambda'; x_0 - x'_0) = \langle \langle \bar{a}(-\lambda, x_0) a(-\lambda', x_0) a(\lambda', x_0) | \bar{a}(\lambda, x'_0) \rangle \rangle^{(+)}. \quad (28.5')$$

На основании (28.1) — (28.3) уравнения (7.7) в данном случае принимают вид ($x_0 - x'_0 = t$)

$$i \frac{\partial G(\lambda, t)}{\partial t} = -\delta(t) + T'(\lambda) G(\lambda, t) + \frac{1}{V} \sum_{\lambda'} B(\lambda, \lambda') G_2(\lambda, \lambda'; t), \quad (28.6)$$

$$\begin{aligned} i \frac{\partial G_2(\lambda, \lambda'; t)}{\partial t} = & -\delta(t) n(-\lambda) [\Delta(\lambda - \lambda') - \Delta(\lambda + \lambda')] + \\ & + [2T'(\lambda') - T'(\lambda)] G_2(\lambda, \lambda'; t) + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda, \lambda'') \times \\ & \times \langle \langle \bar{a}(\lambda'', x_0) \bar{a}(-\lambda'', x_0) a(-\lambda', x_0) a(\lambda', x_0) a(\lambda, x_0) \bar{a}(\lambda', x'_0) \rangle \rangle^{(+)} + \\ & + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda', \lambda'') \langle \langle [1 - n(-\lambda') - n(\lambda')] \bar{a}(-\lambda, x_0) a(-\lambda'', x_0) \times \\ & \times a(\lambda'', x_0) \bar{a}(\lambda', x'_0) \rangle \rangle^{(+)} + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda', \lambda'') G_2(\lambda, \lambda''; t) \times \\ & \times [\Delta(\lambda + \lambda') + \Delta(\lambda - \lambda')], \quad (28.7) \\ & T'(\lambda) \equiv T(\lambda) - \mu. \end{aligned}$$

Здесь, как всегда, Δ есть дельта-функция дискретного аргумента (символ Кронекера),

$$n(\lambda) = \bar{a}(\lambda) a(\lambda). \quad (28.8)$$

Физический интерес представляет исследование асимптотического поведения уравнений (28.6) и (28.7) при $V \rightarrow \infty$. Это позволяет заметно упростить задачу. Действительно, можно показать [16], что средние значения операторов $n(\lambda)$ и $\frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda', \lambda'') \bar{a}(-\lambda') a(-\lambda'') a(\lambda'') \bar{a}(\lambda')$ остаются конечными

при $V \rightarrow \infty$. Поэтому можно предположить, что асимптотически эти операторы коммутируют, и тогда среднее значение их произведения есть произведение средних

$$\begin{aligned} \langle \langle [1 - n(-\lambda') - n(\lambda')] \bar{a}(-\lambda) a(-\lambda'') a(\lambda'') | \bar{a}(\lambda') \rangle \rangle^{(+)} = \\ = [1 - n(\lambda') - n(-\lambda')] G_2(\lambda, \lambda''; t). \end{aligned} \quad (28.9)$$

Здесь $n(\lambda') = \langle n(\lambda') \rangle = \langle \bar{a}(\lambda') a(\lambda') \rangle$. Аналогично преобразуется и третье слагаемое в правой части (28.7). Этот прием расщепления, однако, требует обоснования. Последнее вытекает из результатов работы [20], где было показано, что он позволяет асимптотически точно решить всю цепочку уравнений для функций Грина. Математическое доказательство того, что полученное решение отличается от точного членами порядка $1/N$, дано в работе [21].

Далее член G_2 входит в уравнение (28.6) с множителем $1/V$; поэтому в (28.7) можно асимптотически пренебречь слагаемыми, содержащими $\Delta(\lambda \pm \lambda')$.

Как первое, так и второе упрощения связаны в конечном счете со специальным видом бинарного члена (28.3) в гамильтониане (28.1): суммирование ведется в нем лишь по двум (а не по четырем) переменным.

Итак, уравнения движения принимают вид

$$\begin{aligned} i \frac{\partial G(\lambda, t)}{\partial t} = -\delta(t) + T'(\lambda) G(\lambda, t) + \\ + \frac{1}{V} \sum_{\lambda'} B(\lambda, \lambda') G_2(\lambda, \lambda'; t); \end{aligned} \quad (28.10)$$

$$\begin{aligned} i \frac{\partial G_2(\lambda, \lambda'; t)}{\partial t} = [2T'(\lambda') - T'(\lambda)] G_2(\lambda, \lambda'; t) + \\ + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda, \lambda'') \langle \bar{a}(\lambda'') \bar{a}(-\lambda'') a(-\lambda') a(\lambda') \rangle G(\lambda, t) + \\ + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda', \lambda'') [1 - n(-\lambda') - n(\lambda')] G_2(\lambda, \lambda'; t). \end{aligned} \quad (28.11)$$

Все четыре оператора, стоящие под знаком среднего во втором члене правой части (28.11), берутся в один и тот же момент времени — безразлично в какой именно, поскольку среднее значение от времени не зависит. Введем, как обычно, фурье-образы функций Грина, полагая

$$G(\lambda, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE G(\lambda, E) e^{-iEt}, \quad (28.12)$$

$$G_2(\lambda, \lambda', t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_2(\lambda, \lambda'; E) e^{-iEt}.$$

Получим

$$EG(\lambda, E) = -\frac{1}{2\pi} + T'(\lambda)G(\lambda, E) + \frac{1}{V} \sum_{\lambda'} B(\lambda, \lambda') G_2(\lambda, \lambda', E), \quad (28.13)$$

$$\begin{aligned} EG_2(\lambda, \lambda', E) = & [2T'(\lambda') - T'(\lambda)] G_2(\lambda, \lambda', E) + \\ & + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda, \lambda'') \langle \bar{a}(\lambda'') \bar{a}(-\lambda'') a(-\lambda') a(\lambda') \rangle G(\lambda, E) + \\ & + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda', \lambda'') [1 - n(\lambda') - n(-\lambda')] G_2(\lambda, \lambda''; E). \end{aligned} \quad (28.14)$$

Эту систему мы будем решать уже точно.

Положим

$$\langle \bar{a}(\lambda'') \bar{a}(-\lambda'') a(-\lambda') a(\lambda') \rangle = f(\lambda'') f(\lambda'), \quad (28.15)$$

$$G_2(\lambda, \lambda', E) = \varphi(\lambda, E) f(\lambda'), \quad (28.16)$$

где f и φ — новые неизвестные функции, причем $f(\lambda) = \bar{f}(\lambda)$. Подставляя эти выражения в (28.13) и (28.14), найдем

$$\begin{aligned} [E - T'(\lambda)] G(\lambda, E) = & -\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{V} \sum_{\lambda'} B(\lambda, \lambda') \varphi(\lambda, E) f(\lambda'), \\ [E + T'(\lambda)] \varphi(\lambda, E) f(\lambda') = & \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda, \lambda'') f(\lambda'') G(\lambda, E) f(\lambda') + \\ & + 2T'(\lambda') \varphi(\lambda, E) f(\lambda') + \\ & + \frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda', \lambda'') f(\lambda'') [1 - n(\lambda') - n(-\lambda')] \varphi(\lambda, E). \end{aligned} \quad (28.17)$$

Введем обозначение

$$\frac{1}{V} \sum_{\lambda''} B(\lambda, \lambda'') f(\lambda'') = L(\lambda) \quad (28.18)$$

и подчиним функцию $f(\lambda')$ условию

$$2T'(\lambda') + \frac{L(\lambda')}{f(\lambda')} [1 - n(\lambda') - n(-\lambda')] = 0. \quad (28.19)$$

Тогда система (28.17) приобретет простой вид

$$\begin{aligned} [E - T'(\lambda)] G(\lambda, E) - L(\lambda) \varphi(\lambda, E) &= -\frac{1}{2\pi}, \\ [E + T'(\lambda)] \varphi(\lambda, E) - L(\lambda) G(\lambda, E) &= 0. \end{aligned} \quad (28.20)$$

Отсюда

$$G(\lambda, E) = -\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{E + T'(\lambda)}{E^2 - T'^2(\lambda) - L^2(\lambda)}, \quad (28.21)$$

$$\varphi(\lambda, E) = -\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{L(\lambda)}{E^2 - T'^2(\lambda) - L^2(\lambda)}. \quad (28.22)$$

Полюсы $G(\lambda, E)$ определяют энергетический спектр системы

$$\omega(\lambda) = \sqrt{T'^2(\lambda) + L^2(\lambda)}. \quad (28.23)$$

Легко найти также спектральную функцию для произведения ферми-операторов и среднюю энергию системы. Именно, пусть

$$\langle \bar{a}(\lambda, x'_0) a(\lambda, x_0) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE J(\lambda, E) e^{-iE(x_0 - x'_0)} e^{-\beta E}. \quad (28.24)$$

Тогда в силу (2.7), (3.11), (28.21) и (28.23)

$$\begin{aligned} J(\lambda, E) e^{-\beta E} &= \frac{1}{2} \left[1 + \frac{T'(\lambda)}{\omega(\lambda)} \right] \frac{\delta[E - \omega(\lambda)]}{1 + e^{\beta\omega(\lambda)}} + \\ &+ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{T'(\lambda)}{\omega(\lambda)} \right] \frac{\delta[E + \omega(\lambda)]}{1 + e^{-\beta\omega(\lambda)}}. \end{aligned} \quad (28.25)$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении спектральная функция оказывается дельтаобразной, и затухание отсутствует. Это есть характерная особенность модельного гамильтониана (28.1) (которая, собственно, и делает возможной асимптотически точную его диагонализацию).

Формулы (28.21)—(28.25) еще не носят окончательного характера, ибо содержат неизвестную функцию $L(\lambda)$. Для определения последней воспользуемся равенством (28.18), выразив $f(\lambda)$ через $L(\lambda)$ с помощью дополнительного условия (28.19). Полагая в (28.24) $x'_0 = x_0$ и пользуясь (28.25), получаем

$$n(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\lambda, E) e^{-\beta E} dE = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{T'(\lambda)}{\omega(\lambda)} \operatorname{th} \frac{\beta \omega(\lambda)}{2} \right]. \quad (28.26)$$

В силу (28.26) и (28.19)

$$f(\lambda) = - \frac{L(\lambda)}{2\omega(\lambda)} \operatorname{th} \frac{\beta \omega(\lambda)}{2}; \quad (28.27)$$

подставляя это в (28.18), находим уравнение для функции $L(\lambda)$:

$$L(\lambda) = - \frac{1}{2V} \sum_{\lambda'} B(\lambda, \lambda') \frac{L(\lambda')}{\omega(\lambda')} \operatorname{th} \frac{\beta \omega(\lambda')}{2}. \quad (28.28)$$

Определив отсюда $L(\lambda)$, мы найдем как энергетический спектр (28.23), так и среднюю энергию системы. Действительно, в силу (28.1), (28.15), (28.18) и (28.27) мы имеем

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle &= \sum_{\lambda} T'(\lambda) n(\lambda) + \frac{1}{2V} \sum_{\lambda, \lambda'} B(\lambda, \lambda') f(\lambda) f(\lambda') = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \left\{ T'(\lambda) \left[1 - \frac{T'(\lambda)}{\omega(\lambda)} \operatorname{th} \frac{\beta \omega(\lambda)}{2} \right] - \frac{L^2(\lambda)}{2\omega(\lambda)} \operatorname{th} \frac{\beta \omega(\lambda)}{2} \right\}. \end{aligned} \quad (28.29)$$

В частности, при $\beta \rightarrow \infty$ формула (28.29) дает энергию основного состояния системы.

Приступим теперь к решению уравнения (28.28), следуя работе [17]. Перейдем от суммирования по k к интегрированию и введем новую переменную

$$\xi = T'(\lambda). \quad (28.30)$$

Из симметрии задачи ясно, что $L(\lambda)$ фактически зависит только от ξ ; соответственно уравнение (28.28) принимает вид

$$L(\xi) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\omega_0} k'^2(\xi') \frac{dk'}{d\xi'} d\xi' \times \\ \times \text{th} \left[\frac{\beta\omega(\xi')}{2} \right] \frac{L(\xi')}{2\omega(\xi')} \int_{-1}^{+1} B(\xi, \xi'; l) dl, \quad (28.31)$$

где $l = \cos(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Роль ядра в (28.31) играет интеграл по l от $B(\xi, \xi'; l)$. Для дальнейшего удобно нормировать ядро так, чтобы оно обращалось в единицу при $\xi = \xi' = 0$. Соответственно положим

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} dl B(\xi, \xi'; l) = BF\left(\frac{\xi}{\omega_0}, \frac{\xi'}{\omega_0}\right), \quad (28.32)$$

где F — безразмерная функция, а

$$B = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} dl B(0, 0; l) < 0. \quad (28.33)$$

Очевидно, при этом

$$F(0, 0) = 1. \quad (28.34)$$

Введем также новую неизвестную функцию $\chi(\xi)$, полагая

$$L(\xi) = C\chi(\xi), \quad \chi(0) = 1 \quad (C = \text{const}). \quad (28.35)$$

Ввиду узости области интегрирования по ξ (в 28.31) яacobian $k'^2 \frac{dk'}{d\xi'}$ можно вынести за знак интеграла при $k = k_F$; таким образом, перед интегралом появится множитель

$$\rho = \frac{|B|}{(2\pi)^2} \left(k^2 \frac{dk}{d\xi} \right)_{k=k_F}. \quad (28.36)$$

Наконец, удобно ввести безразмерные величины, полагая

$$x = \frac{\xi}{\omega_0}, \quad \varepsilon(x) = \frac{\omega(\xi)}{\omega_0} = \sqrt{x^2 + b^2 \chi^2(x)}, \\ b = \frac{C}{\omega_0}, \quad a = \frac{2}{\beta\omega_0}. \quad (28.37)$$

Тогда уравнение (28.31) преобразуется к виду

$$\chi(x) = \rho \int_0^{\infty} dx' F(x, x') \frac{\chi(x')}{\varepsilon(x')} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(x')}{a}. \quad (28.38)$$

Предполагая взаимодействие электронов с фононами достаточно слабым, а температуру — низкой, мы можем считать параметры a и b малыми величинами. Однако непосредственное разложение $\chi(x)$ в ряд по степеням b оказывается невозможным, так как при $b \rightarrow 0$, $a \rightarrow 0$, $a/b = \text{const}$ уравнение (28.38) имеет логарифмическую особенность в точке $x = 0$. Именно это обстоятельство делает невозможным применение стандартной теории возмущений к данной задаче.

Чтобы избавиться от особенности, положим в (28.38) $x = 0$, умножим полученное выражение на $F(x, 0)$ и вычтем результат почленно из (28.38). Принимая во внимание (28.35), получим

$$\begin{aligned} \chi(x) = F(x, 0) - \rho \int_0^{\infty} dx' \{F(x, x') - F(x, 0) F(0, x')\} \times \\ \times \frac{\chi(x')}{\varepsilon(x')} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(x')}{a}. \end{aligned} \quad (28.39)$$

В силу (28.34) фигурная скобка здесь обращается в нуль при $x = 0$, что и позволяет совершить предельный переход $a \rightarrow 0$, $b \rightarrow 0$. При этом получается регулярное линейное уравнение

$$\chi(x) = F(x, 0) - \rho \int_0^{\infty} dx' \frac{F(x, x') - F(x, 0) F(0, x')}{x'} \chi(x'), \quad (28.40)$$

которое можно решать обычными методами. В частности, в модели Бардина $F(x, x') = 1$ при $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq x' \leq 1$ и $F(x, x') = 0$ вне этой области; следовательно, $\chi(x) = F(x, 0)$. Соответственно

$$\varepsilon(x) = \sqrt{x^2 + b^2} = \sqrt{x^2 + C^2/\omega_0^2};$$

подставляя это выражение в (28.38), получаем уравнение

для определения константы C (и тем самым L):

$$1 = \rho \int_0^1 dx' \frac{\operatorname{th} \frac{V \sqrt{x^2 + C^2 \omega_0^{-2}}}{a}}{V \sqrt{x^2 + C^2 \omega_0^{-2}}}. \quad (28.41)$$

Из формул (28.23) и (28.35) следует, что при $C \neq 0$ в рассматриваемой системе спектр элементарных возбуждений (фермиевской ветви) начинается не от нуля, а от некоторого конечного значения, равного $|C|$ (щель). Именно это обстоятельство в конечном счете и ответственно за явление сверхпроводимости [18]. Исследование уравнения (28.41), выполненное в [17], [19], показывает, что фактически щель имеется лишь при достаточно малых значениях параметра a , что и определяет критическую температуру перехода в сверхпроводящее состояние. Мы ограничимся здесь лишь вычислением спектра при абсолютном нуле ($\beta \rightarrow \infty$). Тогда уравнение (28.41) дает

$$C = 2\omega_0 e^{-1/\rho} \quad (28.42)$$

и, следовательно,

$$\omega(k) = \sqrt{T'^2(k) + 4\omega_0^2 e^{-2/\rho}}. \quad (28.43)$$

Обращаясь к (28.36), видим, что энергия $\omega(k)$, рассматриваемая как функция «параметра взаимодействия» B , имеет существенно особую точку при $B \rightarrow 0$. Это есть следствие сингулярности уравнения (28.38), т. е., в конечном счете, следствие особенностей системы, которые отображаются специальной структурой гамильтониана (28.1).

ГЛАВА VII

ФЕРРОМАГНЕТИЗМ

§ 29. Спиновые волны при конечных температурах¹⁾

В этой главе мы применим метод функций Грина для исследования простейшей задачи теории ферромагнетизма — задачи о вычислении намагниченности изотропного ферромагнетика как функции температуры и внешнего поля. Следует заметить, что для области низких и для области высоких температур здесь имеются достаточно разработанные и эффективные методы расчета. Так, для случая низких температур ($T \ll T_c$, где T_c — температура Кюри) разработаны методы спиновых волн или приближенного вторичного квантования (изложение основных идей последнего см. в [3]), ведущих свою родословную от известной работы Ф. Блоха [4]. Существенный шаг вперед в этой области составили работы Ф. Дайсона [5]. В них были получены регулярные разложения по степеням температуры, что позволило расширить область применимости метода спиновых волн до температур

порядка $\frac{1}{4} T_c$. В последнее время эти результаты получены также иным методом [6]. В области высоких температур положение несколько хуже, и для температур $T \sim T_c$ имеется, по существу, только весьма грубый метод молекулярного поля [7]. Наконец, при $T \gg T_c$ можно воспользоваться обычным методом теории возмущений. Применение его позволило построить регулярные разложения намагниченности по обратным степеням температуры [8].

Таким образом, имеющиеся в теории ферромагнетизма различные методы расчета свободной энергии, намагничен-

¹⁾ См. [1], [2].

ности и т. д., применимы каждый лишь в своем температурном интервале. Мы увидим, что с помощью функций Грина оказывается возможным развить единую приближенную методику расчета намагниченности, применимую во всем интервале температур [2].

Пусть исследуемый ферромагнетик состоит из N атомов ферромагнитного элемента, образующих правильную простую решетку. Будем считать далее, что каждый атом имеет по одному «ферромагнитному» электрону и что взаимодействием этих электронов с электронами проводимости можно пренебречь. Наконец, будем учитывать только обменное взаимодействие электронов и считать, что в магнитном отношении наш ферромагнетик изотропен. В сделанных предположениях рассматриваемая система описывается гамильтонианом Гейзенберга, который, будучи выражен через операторы Паули [см. (6.19)], имеет вид

$$H = C + [2\mu\mathcal{H} + 2A'(0)] \sum_f n(f) - 2 \sum_{f_1, f_2} A(f_1 - f_2) \bar{b}(f_1) b(f_2) - \sum_{f_1, f_2} 2A(f_1 - f_2) n(f_1) n(f_2). \quad (29.1)$$

Здесь

$$C = -\frac{1}{2} N A'(0) - N \mu \mathcal{H}, \quad n(f) = \bar{b}(f) b(f), \\ A'(\mathbf{k}) = \sum_f A(\mathbf{f}) e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{f})}; \quad A(0) = 0; \quad (29.2)$$

f — номер узла решетки, $A(f_1 - f_2)$ — обменный интеграл для электронов, находящихся в узлах f_1 и f_2 , $A'(\mathbf{k})$ — фурье-образ $A(\mathbf{f})$, $\mathcal{H}$ — внешнее магнитное поле, μ — магнетон Бора.

Следуя методу, изложенному в § 6, введем функции Грина

$$G(g, f; x_0 - x'_0) = \langle \langle b(g, x_0) | \bar{b}(f, x'_0) \rangle \rangle^{(-)}, \quad (29.3)$$

$$G_2(g_1, g_2, f; x_0 - x'_0) = \\ = \langle \langle n(g_1, x_0) b(g_2, x_0) | \bar{b}(f, x'_0) \rangle \rangle^{(-)} \quad (29.3a)$$

и составим для них уравнения движения типа (6.1). Пользуясь выражением (29.1) для гамильтониана, правилами

перестановки для операторов Паули и полагая $x_0 - x'_0 = t$, легко находим

$$i \frac{\partial G(g, f; t)}{\partial t} = -(1 - 2n) \Delta(g - f) \delta(t) + \\ + [2\mu \mathcal{H} + 2A'(0)] G(g, f; t) - \sum_{g'} 2A(g - g') G(g', f; t) + \\ + \sum_{g'} 4A(g - g') [G_2(g, g', f; t) - G_2(g', g, f; t); \dots] \quad (29.4)$$

Здесь n — среднее значение оператора $\bar{b}(g) b(g)$:

$$n = \langle \bar{b}(g) b(g) \rangle, \quad (29.5)$$

не зависящее от координат узла g . Таким путем нетрудно получить далее и уравнения для функций $G_2(g_1, g_2, f; t)$ и т. д. Мы не выписываем здесь последующих уравнений, поскольку ниже ограничимся учетом лишь первой функции Грина.

Расцепим цепочку уравнений (29.4) на первом из них, полагая

$$G_2(g_1, g_2, f; t) \equiv \langle \langle n(g_1, x_0) b(g_2, x_0) | \bar{b}(f, x'_0) \rangle \rangle^{(-)} \cong \\ \cong \langle n(g_1) \rangle \langle \langle b(g_2, x_0) | \bar{b}(f, x'_0) \rangle \rangle^{(-)} = n G(g_2, f; t). \quad (29.6)$$

Подставляя это выражение в (29.4), получим следующее уравнение первого приближения:

$$i \frac{\partial G(g, f; t)}{\partial t} - [2\mu \mathcal{H} + (1 - 2n) 2A'(0)] G(g, f; t) + \\ + \sum_{g'} (1 - 2n) 2A(g - g') G(g', f; t) = \\ = -(1 - 2n) \Delta(g - f) \delta(t). \quad (29.7)$$

Заметим, что в применении к теории ферромагнетизма предложенный способ расцепления в первом приближении соответствует методу приближенного вторичного квантования [9]. Действительно, в названном методе (применительно к ферромагнетикам) операторы Паули $b(f)$, $\bar{b}(f)$ приближенно объявляются бозевским, и, кроме того, отбрасывается последний член в гамильтониане (29.1). Если в этих предположениях написать уравнения для функций Грина, то они

совпадут с уравнением (29.7) при $n=0$. При этом цепочка уравнений расцепится на первом из них. Далее можно улучшить этот способ, выделяя из отбрасывавшегося доселе члена части типа $\pi\pi(g)$ и принимая их во внимание; при этом также можно получить уравнения вида (29.7).

Перейдем теперь от функций $G(g, f; t)$ к их фурье-образам

$$G(g, f; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(g, f; E) e^{-iEt} dE. \quad (29.8)$$

Тогда уравнение (29.7) примет вид

$$\begin{aligned} \{E - 2\mu\mathcal{H} - (1 - 2n)2A'(0)\} G(g, f; E) + \\ + \sum_{g'} (1 - 2n)2A(g - g') G(g', f; E) = \\ = -\frac{1}{2\pi} (1 - 2n) \Delta(g - f). \end{aligned} \quad (29.9)$$

Полагая далее

$$G(g, f; E) = \frac{1}{N} \sum_k e^{-i(g-f, k)} G(k, E), \quad (29.10)$$

получаем [ср. (5.15) и (5.16)]

$$G(k, E) = -\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1 - 2n}{E - W(k)}, \quad (29.11)$$

где

$$W(k) = 2\mu\mathcal{H} + (1 - 2n)[2A'(0) - 2A'(k)]. \quad (29.12)$$

Отсюда получаем, согласно (4.6), следующее выражение для спектральной функции:

$$J(k, E) = \frac{1 - 2n}{1 - e^{-\beta W(k)}} \delta[E - W(k)]. \quad (29.13)$$

Далее, согласно (29.10),

$$J(g, f; E) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1 - 2n}{1 - e^{-\beta W(k)}} \delta[E - W(k)] e^{i(g-f, k)}. \quad (29.14)$$

Воспользуемся теперь формулой (2.7), выражающей среднее значение произведения операторов через спектральную функцию

$$\begin{aligned} \langle \bar{b}(f, x'_0) b(g, x_0) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iE(x_0 - x'_0)} J(g, f; E) e^{-\beta E} dE = \\ &= \frac{1}{N} \sum_k e^{i(g-f, k) - iW(k)(x_0 - x'_0)} \frac{1 - 2n}{e^{\beta W(k)} - 1}. \end{aligned} \quad (29.15)$$

Полагая здесь $x'_0 = x_0$, $g = f$, получаем уравнение для определения величины n (29.5), оставшейся пока не определенной:

$$n = \frac{1 - 2n}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\beta W(k)} - 1}, \quad (29.16)$$

или, переходя от суммирования по волновым векторам k к интегрированию:

$$n = (1 - 2n) \frac{v}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{e^{\beta W(k)} - 1}. \quad (29.17)$$

Здесь $v = \frac{V}{N}$ есть объем элементарной ячейки, а интеграл по k берется по ячейке обратной решетки.

Введем для удобства относительную намагниченность σ , определяя ее как намагниченность на один узел. Замечая, что z -компонента спина связана с оператором спинного отклонения $\pi = \bar{b}b$ по формулам (II.3), можем записать

$$\sigma \equiv \langle \sigma_z(g) \rangle = \langle 1 - 2\pi(g) \rangle = 1 - 2n. \quad (29.18)$$

При этом уравнение (29.17) принимает вид

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \text{cth} \frac{\beta W(k)}{2} dk. \quad (29.19)$$

Как видно из формулы (29.11), фурье-образ функции Грина $G(k, E)$ имеет полюс при $E = W(k)$, и, следовательно, $W(k)$ есть энергия элементарного возбуждения в ферромагнетике (энергия «спиновой волны»). Выражение для $W(k)$ имеет такой же вид, как и обычная формула для энергии спиновой волны

$$W_{\text{сп. волны}}(k) = 2\mu\mathcal{H} + 2A'(0) - 2A(k), \quad (29.20)$$

отличаясь от нее тем, что часть, зависящая от волнового вектора, пропорциональна относительной намагниченности $\sigma = 1 - 2n$ (29.18). Благодаря этому обстоятельству энергия элементарного возбуждения $W(\mathbf{k})$ оказывается зависящей от температуры.

§ 30. Намагниченность в различных интервалах температуры ¹⁾

Задача об определении относительной намагниченности как функции температуры и поля сводится в первом приближении к решению уравнения (29.19). Покажем теперь, что оно дает достаточно удовлетворительную интерполяцию для намагниченности во всем интервале температур. Для этой цели установим, что при $T \ll T_c$ для σ получается известный приближенный результат Блоха [4], при $T \leq T_c$ — результат приближения молекулярного поля, а при $T \gg T_c$ — результаты теории парамагнетизма.

Введем для удобства безразмерные величины

$$L = \frac{\mu \mathcal{H}}{A'(0)}, \quad \tau = \frac{1}{\beta A'(0)}, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = 1 - \frac{A'(\mathbf{k})}{A'(0)} \quad (30.1)$$

(константа $A'(0) = \sum_f A(f)$ представляет собой среднюю величину обменного взаимодействия и пропорциональна температуре Кюри) и запишем уравнение (29.19) в безразмерной форме

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \operatorname{cth} \frac{L + \sigma \varepsilon(\mathbf{k})}{\tau} d\mathbf{k}. \quad (30.2)$$

Рассмотрим сначала случай низких температур. Тогда величина $\tau \rightarrow 0$, $\frac{L + \sigma \varepsilon(\mathbf{k})}{\tau} \gg 1$, и для котангенса в (30.2) удобно взять разложение

$$\operatorname{cth} \xi = 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} e^{-2l\xi}.$$

¹⁾ См. [2].

Тогда уравнение (30.2) можно переписать в виде

$$\frac{1}{\sigma} = 1 + \mathcal{P}\left(\frac{\tau}{\sigma}; \frac{L}{\tau}\right);$$

$$\mathcal{P} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{v}{(2\pi)^3} \int \exp\left(-2l \frac{L + \sigma \varepsilon(k)}{\tau}\right) dk. \quad (30.3)$$

Отсюда нетрудно найти главный член в разложении σ по степеням безразмерной температуры τ . Следует лишь принять во внимание, что основной вклад в интеграл (30.3) дает область малых волновых векторов, и, соответственно, можно приближенно положить

$$\varepsilon(k) \cong \alpha k^2, \quad \alpha = \frac{1}{6A'(0)} \sum_f f^2 A(f). \quad (30.4)$$

В результате получим для величины $\mathcal{P}$:

$$\mathcal{P}\left(\frac{\tau}{\sigma}, \frac{L}{\tau}\right) = 2v \left(\frac{\tau}{8\pi\alpha\sigma}\right)^{3/2} z_{3/2}\left(\frac{L}{\tau}\right), \quad (30.5)$$

где

$$z_p(x) = \sum_{l=1}^{\infty} l^{-p} e^{-lx}. \quad (30.6)$$

Соответственно уравнение (30.3) запишется следующим образом:

$$\sigma = 1 - 2v \left(\frac{\tau}{8\pi\alpha\sigma}\right)^{3/2} z_{3/2}\left(\frac{L}{\tau}\right) \sigma. \quad (30.7)$$

Будем решать это уравнение итерациями, полагая в нулевом приближении $\sigma_0 = 1$. Тогда с точностью до членов порядка $\tau^{3/2}$ включительно

$$\sigma \cong 1 - 2v \left(\frac{\tau}{8\pi\alpha}\right)^{3/2} z_{3/2}\left(\frac{L}{\tau}\right), \quad (30.8)$$

что совпадает с результатом метода спиновых волн Блоха. Чтобы получить выражение для σ в виде ряда по степеням τ , разложим $\varepsilon(k)$ по степеням k и вычислим $\mathcal{P}$ как функцию отношения τ/σ с заданной степенью точности:

$$\mathcal{P}\left(\frac{\tau}{\sigma}; \frac{L}{\tau}\right) = a_1 \left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\sigma}\right)^{3/2} + a_2 \left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\sigma}\right)^{5/2} +$$

$$+ a_3 \left(\frac{L}{\tau}\right) \left(\frac{\tau}{\sigma}\right)^{7/2} + \dots \quad (30.9)$$

Здесь $a_1, a_2, a_3, \dots$ суть некоторые функции от L/τ . Решая затем уравнение (30.3) относительно σ , получаем

$$\sigma = 1 - \sum_{j \geq 3} A_j \tau^{j/2}, \quad (30.10)$$

где A_j — функции от L/τ , зависящие также от структуры кристаллической решетки. В частности,

$$A_3 = \frac{2v}{(8\pi\alpha)^{3/2}} z_{3/2} \left(\frac{L}{\tau} \right), \quad A_4 = 0. \quad (30.11)$$

Рассмотрим, например, простую кубическую решетку, принимая во внимание взаимодействие только между ближайшими соседями. Тогда для нескольких первых коэффициентов A_j мы получим

$$\begin{aligned} A_3 &= 2 \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{3/2} z_{3/2}, & A_4 &= 0, \\ A_5 &= \frac{3\pi}{2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{5/2} z_{5/2}, & A_6 &= 2 \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{6/2} z_{6/2}, \\ A_7 &= \frac{33\pi^2}{16} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{7/2} z_{7/2}, & A_8 &= 6\pi \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{8/2} z_{3/2} \cdot z_{5/2}, \dots \end{aligned} \quad (30.12)$$

Как видно из формул (30.10) — (30.12), для относительной намагнитченности в случае низких температур первые два члена разложения дают результаты Блоха, а следующие члены — поправки к ним.

Представляет интерес сравнение (30.10) — (30.12) с результатами работы Дайсона [5], согласно которой в разложении вида (30.10) $A_4 = A_6 = 0$ и для простой кубической решетки

$A_8 = 10\pi \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{8/2} z_{3/2} \cdot z_{5/2}$ (в наших обозначениях). Можно думать, что расхождение наших результатов с результатами Дайсона связано с недостаточностью расщепления цепочки уравнений для функций Грина на первом из них.

Обратимся теперь к случаю высоких температур в отсутствие внешнего поля ($T \leq T_c$, $L = 0$). Заметим прежде всего, что рассматриваемая система имеет точку фазового превращения, выше которой спонтанная намагнитченность исчезает. Действительно, при $\tau \rightarrow \infty$ величина $\sigma \leq 1$, и потому

$\frac{\sigma \varepsilon(k)}{\tau} \rightarrow 0$. Поскольку при $\xi \rightarrow 0$ $\operatorname{cth} \xi \rightarrow 1/\xi$, уравнение (30.2) дает при этом

$$\frac{1}{\sigma} \approx \frac{\tau}{\sigma} \cdot \frac{v}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{\varepsilon(k)}. \quad (30.13)$$

Отсюда следует, что при достаточно больших температурах решение отсутствует. Чтобы исследовать поведение решения в зависимости от τ , предположим, как обычно, что $\sigma \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \tau_c$ ($\tau < \tau_c$). Константу τ_c будем называть температурой Кюри. При малых ξ ($\xi = \frac{\sigma \varepsilon(k)}{\tau}$) мы имеем

$$\operatorname{cth} \xi = \frac{1}{\xi} + \sum_{l=1}^{\infty} 2^{2l} \frac{B_{2l}}{(2l)!} \xi^{2l-1},$$

где B_{2l} — числа Бернулли ($B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$, ...). Подставим это разложение в (30.2) и введем обозначение

$$\frac{1}{\tau_c} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{\varepsilon(k)}. \quad (30.14)$$

Получим

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{\tau}{\tau_c} \cdot \frac{1}{\sigma} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2^{2l} B_{2l}}{(2l)!} \left(\frac{\sigma}{\tau}\right)^{2l-1} C_{2l-1}, \quad (30.15)$$

где

$$C_n = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \varepsilon^n(k) dk \quad (30.15a)$$

(очевидно, $C_1 = 1$). Отсюда находим

$$\frac{\sigma}{\tau} = \sqrt{\frac{3}{\tau} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_c}\right)} \left\{ 1 + 3 \sum_{l=2}^{\infty} \frac{2^{2l} B_{2l}}{(2l)!} C_{2l-1} \left(\frac{\sigma}{\tau}\right)^{2l-2} \right\}^{-1/2}. \quad (30.16)$$

Уравнение в такой форме удобно решать методом итераций. В частности, в нулевом приближении мы имеем

$$\sigma \approx \tau \sqrt{\frac{3}{\tau} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_c}\right)}, \quad (30.17)$$

что соответствует обычному приближению молекулярного поля,

Из выражения (30.17), равно как и из (30.16), видно, что решение существует лишь при $\tau \leq \tau_c$ и обращается в нуль при $\tau = \tau_c$. Величина τ_c , определяемая формулой (30.14), есть температура Кюри.

В приближении ближайших соседей принятая здесь единица энергии есть $A'(0) = \nu A$ (A — величина обменного интеграла, ν — число ближайших соседей). Температуру Кюри при этом легко найти численно. Для трех кубических решеток — простой, объемноцентрированной и гранецентрированной — мы получаем соответственно

$$\tau_c = 0,66; 0,725; 0,745. \quad (30.18)$$

Для температур, близких к τ_c , можно построить разложение для σ в виде ряда по степеням корня квадратного из разности $\tau_c - \tau$. Мы приведем здесь, как и выше, несколько первых членов ряда для простой кубической решетки в приближении ближайших соседей

$$\begin{aligned} \sigma &= \tau u \left\{ 1 + 5 \cdot 10^{-2} u^2 - 5 \cdot 10^{-4} u^4 + \dots \right\}, \\ u &= \sqrt{\frac{3}{\tau} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_c} \right)}. \end{aligned} \quad (30.19)$$

Наконец, рассмотрим область выше точки Кюри в присутствии внешнего поля ($\tau \geq \tau_c$; $L \neq 0$).

Здесь желательно получить решение в форме, допускающей сопоставление с результатами работы Опеховского [8]. Для этой цели придадим уравнению (30.2) вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} &= \frac{1}{t_0} \left\{ 1 + (1 - t_0^2) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{t_0^l} \cdot \frac{\nu}{(2\pi)^3} \int \text{th}^l \frac{\sigma \varepsilon(\mathbf{k})}{\tau} d\mathbf{k} \right\}, \\ t_0 &= \text{th } L/\tau. \end{aligned} \quad (30.20)$$

Подставляя сюда разложения гиперболического тангенса по степеням аргумента и ограничиваясь членами порядка $(\sigma/\tau)^2$ включительно, получаем следующее приближенное уравнение для σ :

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{t_0} \left\{ 1 - \frac{1 - t_0^2}{t_0} \frac{\sigma}{\tau} + \frac{1 - t_0^2}{t_0^2} \left(\frac{\sigma}{\tau} \right)^2 C_2 \right\}. \quad (30.21)$$

Коэффициент C_2 определяется согласно (30.15а). Отсюда с точностью до членов порядка $1/\tau^2$ находим

$$\sigma = t_0 + t_0(1 - t_0^2) \frac{1}{\tau} + t_0(1 - t_0^2)(2 - C_2 - 2t_0^2) \frac{1}{\tau^2}. \quad (30.22)$$

Для случая ближайших соседей (число которых есть ν) $C_2 = \frac{1+\nu}{\nu}$, и следовательно,

$$\sigma = t_0 + t_0(1 - t_0^2) \frac{1}{\tau} + t_0(1 - t_0^2) \left(\frac{\nu-1}{\nu} - 2t_0^2 \right) \frac{1}{\tau^2}. \quad (30.23)$$

При температурах выше точки Кюри мы придали такой вид уравнению (30.20) для удобства сравнения с результатами [8], полученными по стандартной термодинамической теории возмущений (применение последней в этой области температур не вызывает сомнений). В наших обозначениях намагниченность, рассчитанная по формулам (30.23), отличается от результатов [8] на величину порядка $1/\nu\tau^2$:

$$\sigma_{(30.23)} - \sigma_{\text{Опехов.}} = \frac{1 - t_0^2}{\nu\tau^2}, \quad (30.24)$$

так что и здесь согласие нашего приближенного результата с точным можно считать достаточно удовлетворительным.

Итак, уравнение (30.2) действительно дает достаточно удовлетворительные результаты для намагниченности во всем интервале температур.

Особо следует отметить, что оно описывает, в частности, и фазовый переход из ферромагнитного состояния в парамагнитное. Напомним в связи с этим, что так же обстояло дело и в теории сверхпроводимости, рассматривавшейся в предыдущей главе. Мы видим, таким образом, что в соответствии со сказанным во введении к книге метод функций Грина дает известную возможность подойти к изучению фазовых превращений.

Зная корреляционную функцию $\langle \bar{b}(f) b(g) \rangle$, нетрудно было бы вычислить и другие термодинамические величины, например среднюю энергию и др. Мы не будем здесь останавливаться на этом.

Следует отметить, что исследованные решения существуют для всех полей $\mathcal{H}$ лишь при положительном знаке обменного интеграла,

При $A < 0$ (случай антиферромагнетизма) рассмотренное выше решение существует лишь в достаточно сильных полях $\mu\mathcal{H} > 2\sigma |A'(0)|$. В противном случае спектральная функция $J(E)$ была бы отрицательна, что невозможно в силу (4.2) (это означало бы в данном случае, что среднее число заполнения n отрицательно). Для исследования случая $A < 0$, $\mu\mathcal{H} < 2\sigma |A'(0)|$ изложенную схему необходимо несколько видоизменить, вводя две или несколько подрешеток (см. [21]), подобно тому, как это делается при решении задачи об антиферромагнетике в методе приближенного вторичного квантования или в методе молекулярного поля.

Желая перейти далее ко второму приближению, мы должны были бы написать уравнение для двухчастичной функции Грина и приближенно выразить входящие в него трехчастичные функции через низшие.

§ 31. Ферромагнитный резонанс¹⁾

Как известно, явление ферромагнитного резонанса состоит в том, что система спинов, связанных обменными силами, будучи помещена в постоянное магнитное поле и переменное радиочастотное поле, поглощает энергию последнего. Кривая поглощения как функция частоты поля имеет более или менее резко выраженный максимум при некоторой частоте (частоте резонанса), зависящей главным образом от величины постоянного внешнего поля. Классический и квантовый аспекты теории ферромагнитного резонанса были предметом многочисленных исследований ряда авторов (см., например, сборник [11]).

Мы рассмотрим здесь вопрос о частоте ферромагнитного резонанса с помощью общей методики § 14. Это позволит нам в сочетании с результатами предшествующего параграфа получить формулы, пригодные для всех температур.

В задаче о ферромагнитном резонансе нужно уметь находить приращения средних значений намагниченности $\delta \tilde{m}_i(x_0)$ ($i = 1, 2, 3$), обусловленные влиянием радиочастотного поля $h_i(x_0)$. Именно с ними связана комплексная восприимчивость χ :

$$\delta \tilde{m}(x_0) = \chi h(x_0), \quad (31.1)$$

¹⁾ См. [10].

определяющая передачу энергии от радиочастотного поля к спиновой системе. Замечая, что

$$\delta \tilde{m}_i(x_0) = \mu \delta \tilde{S}_i(f, x_0), \quad (31.2)$$

видим, что задача свелась к вычислению средних приращений спиновых операторов $\delta \tilde{S}_i(f, x_0)$ (в силу трансляционной инвариантности величина $\delta \tilde{S}_i(f, x_0)$ фактически не зависит от аргумента f).

При наличии внешнего радиочастотного поля гамильтониан системы можно представить в виде

$$H = H_0 + \Delta H(x_0). \quad (31.3)$$

Оператор ΔH описывает взаимодействие системы с радиочастотным полем, а H_0 включает все остальные взаимодействия: обменное, с внешним постоянным магнитным полем и др.

Примем для определенности, что постоянное магнитное поле $\mathcal{H}$ направлено по оси z , а поле h — лежит в плоскости (x, y) . Кроме того, предположим, как обычно, что длина волны радиочастотного поля велика по сравнению с размерами образца, так что поле можно считать пространственно однородным. Тогда для $\Delta H(x_0)$ будем иметь

$$\Delta H(x_0) = -\mu \sum_{\beta, f} h_{\beta}(x_0) S_{\beta}(x_0, f). \quad (31.4)$$

Здесь и ниже в этой главе греческие индексы, в отличие от остальной части книги, принимают значения 1 и 2. Функцию $h_{\beta}(x_0)$ представим в виде

$$h_{\beta}(x_0) = \sum_{\omega} h_{\beta}(\omega) e^{-i\omega x_0 - \varepsilon |x_0|}. \quad (31.5)$$

Тогда гамильтониан (31.4) оказывается суммой стандартных выражений типа (14.1) и для магнитной восприимчивости можно воспользоваться общей формулой (14.10). Следует лишь специализировать ее для данной конкретной системы, понимая под C_2 и C_1 операторы спинового магнитного момента.

Рассмотрим случай плоскополяризованного радиочастотного поля. Так как мы ограничиваемся здесь приближением

линейным по внешнему полю, то формулу (31.4) можно взять в виде

$$\Delta H(x_0) = -\mu e^{-i\omega x_0} \sum_{\beta, f} h_{\beta} S_{\beta}(f). \quad (31.6)$$

На основании (14.10) имеем тогда

$$\chi_{\alpha\beta} = -\mu^2 \sum_{(f)} 2\pi \langle \langle S_{\alpha}(g) | S_{\beta}(f) \rangle \rangle_{r, E=\omega}. \quad (31.7)$$

Таким образом, для вычисления магнитной восприимчивости нужно найти фурье-образы функции Грина $\langle \langle S_{\alpha}(g) | S_{\beta}(f) \rangle \rangle$.

Удобно перейти от спиновых операторов к операторам Паули (см. приложение II)

$$\begin{aligned} S_1(f) &= b(f) + \bar{b}(f), & S_2(f) &= i[\bar{b}(f) - b(f)]; \\ S_3 &= 1 - 2n(f). \end{aligned} \quad (31.8)$$

Тогда формула (31.7) принимает вид

$$\chi_{11} = 2\pi\mu^2 \sum_f \{G_{11}(g, f) + G_{22}(g, f) + G_{21}(g, f) + \\ + G_{12}(g, f)\}_{E=\omega}, \quad (31.9)$$

$$\chi_{21} = 2\pi i\mu^2 \sum_f \{-G_{11}(g, f) + G_{22}(g, f) + G_{21}(g, f) - \\ - G_{12}(g, f)\}_{E=\omega},$$

$$\chi_{12} = 2\pi i\mu^2 \sum_f \{G_{11}(g, f) - G_{22}(g, f) + G_{21}(g, f) - \\ - G_{12}(g, f)\}_{E=\omega},$$

$$\chi_{22} = 2\pi\mu^2 \sum_f \{G_{11}(g, f) + G_{22}(g, f) - G_{21}(g, f) - \\ - G_{12}(g, f)\}_{E=\omega}.$$

Здесь введены обозначения [ср. (29.3)]

$$G_{11}(g, f) = \langle \langle b(g) | \bar{b}(f) \rangle \rangle^{(-)}, \quad G_{22}(g, f) = \langle \langle \bar{b}(g) | b(f) \rangle \rangle^{(-)}, \quad (31.10)$$

$$G_{21}(g, f) = \langle \langle \bar{b}(g) | \bar{b}(f) \rangle \rangle^{(-)}, \quad G_{12}(g, f) = \langle \langle b(g) | b(f) \rangle \rangle^{(-)}. \quad (31.11)$$

Функции G_{11} , G_{12} , G_{21} , G_{22} определяются из решения соответствующих уравнений, вид которых зависит от конкретной формы гамильтониана H_0 . Для изотропного ферромагнетика,

находящегося в постоянном поле, направленном по оси z , мы имеем

$$H_0 = -\mu \mathcal{H} \sum_f S_z(f) - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} A(f_1 - f_2) (S(f_1), S(f_2)). \quad (31.12)$$

Для образца ограниченных размеров нужно учитывать также размагничивающее действие его концов. Классическое выражение для энергии размагничивания (на один атом) для образца эллипсоидальной формы имеет вид

$$H_{\text{размагн.}} = \frac{1}{2N} \sum_i N_i M_i^2 \quad (i = 1, 2, 3), \quad (31.13)$$

где N — число узлов решетки, N_i — фактор размагничивания и M_i — компонента вектора намагниченности по оси i . Для того чтобы перейти от классического выражения к квантовому, будем понимать под M_i компоненты оператора полного момента [12]:

$$M_i = \mu \sum_f S_i(f). \quad (31.14)$$

Соответственно для образца эллипсоидальной формы гамильтониан H_0 представляет собой, вообще говоря, сумму (31.12) и (31.13).

В операторах Паули часть гамильтониана, соответствующая (31.13), принимает вид

$$\begin{aligned} H_{\text{размагн.}} = & \frac{1}{2} N N_3 \mu^2 - 2\mu^2 N_3 \sum_f n(f) + \\ & + \frac{2\mu^2 N_3}{N} \sum_{f_1, f_2} n(f_1) n(f_2) + \frac{\mu^2}{2N} (N_1 - N_2) \sum_{f_1, f_2} [b(f_1) b(f_2) + \\ & + \bar{b}(f_1) \bar{b}(f_2)] + \frac{\mu^2}{N} (N_1 + N_2) \sum_{f_1, f_2} \bar{b}(f_1) b(f_2) + O\left(\frac{1}{N}\right). \end{aligned} \quad (31.15)$$

Рассмотрим отдельно случай неограниченной среды и случай образца эллипсоидальной формы.

а) Неограниченная среда. В этом случае гамильтониан H_0 совпадает с (31.12), и для определения функций Грина можно непосредственно воспользоваться результа-

тами § 29. В первом приближении мы имеем согласно (29.10) и (29.11)

$$G_{11}(g, f; E) = -\frac{\sigma}{2\pi} \cdot \frac{1}{N} \sum_k e^{i(g-f, k)} \frac{1}{E - W(k)}, \quad (31.16)$$

$$G_{22}(g, f; E) = G_{11}(g, f; -E), \quad (31.17)$$

$$G_{21}(g, f; E) = G_{12}(g, f; E) = 0, \quad (31.18)$$

$$W(k) = 2\mu\mathcal{H} + \sigma[2A'(0) - 2A'(k)]. \quad (31.19)$$

Так как фурье-образы запаздывающих функций Грина определены лишь при $\text{Im} E > 0$ (см. § 3), то ниже мы всюду будем полагать

$$\frac{1}{E - W(k)} = \mathcal{P} \frac{1}{E - W(k)} - \pi i \delta[E - W(k)]. \quad (31.20)$$

Подставляя в (31.9) выражения (31.16) — (31.18) и принимая во внимание (31.20), находим

$$\chi_{\alpha\beta} = \chi'_{\alpha\beta} + i\chi''_{\alpha\beta}, \quad \chi_{11} = \chi_{22}, \quad \chi_{12} = -\chi_{21}, \quad (31.21)$$

$$\chi'_{11} = \chi_0 \mathcal{P} \left[1 - \left(\frac{\omega}{E_0} \right)^2 \right]^{-1}, \quad \chi''_{11} = \frac{\pi}{2} \chi_0 E_0 \delta(\omega - E_0), \quad (31.22)$$

$$\chi'_{21} = \frac{\pi}{2} \chi_0 E_0 \delta(\omega - E_0), \quad \chi''_{21} = -\frac{\omega}{E_0} \chi_0 \mathcal{P} \left[1 - \left(\frac{\omega}{E_0} \right)^2 \right]^{-1},$$

где

$$\chi_0 = \frac{2\mu^2\sigma}{E_0} \equiv \frac{\mu\sigma}{\mathcal{H}}, \quad E_0 = 2\mu\mathcal{H}. \quad (31.23)$$

Формула (31.23) определяет резонансную частоту E_0 для неограниченной среды. Из опыта известно, однако, что форма образца оказывает существенное влияние на условия резонанса; поэтому формула (31.23) представляет в основном лишь методический интерес.

б) Образец эллипсоидальной формы. В этом случае гамильтониан H_0 дается суммой (31.12) и (31.13), и функции Грина надлежит определять заново. Уравнения для них получаются обычным методом. Как и в § 29, оборвем цепочку уравнений на первом из них, полагая

$$\langle \langle n(g) b(g') | \bar{b}(f) \rangle \rangle^{(-)} \approx \langle n(g) \rangle \langle \langle b(g') | \bar{b}(f) \rangle \rangle^{(-)} = n G_{11}(g', f), \quad (31.24)$$

$$\langle \langle n(g) \bar{b}(g') | \bar{b}(f) \rangle \rangle^{(-)} \approx \langle n(g) \rangle \langle \langle \bar{b}(g') | \bar{b}(f) \rangle \rangle^{(-)} = n G_{21}(g', f). \quad (31.25)$$

В результате для функций G получим следующую систему уравнений:

$$i \frac{\partial G_{11}(\mathbf{g}, \mathbf{f}, t)}{\partial t} = -\sigma \Delta(\mathbf{g} - \mathbf{f}) \delta(x_0 - x'_0) + \\ + \frac{\sigma \mu^2}{N} (N_1 - N_2) \sum_{\mathbf{g}'} G_{21}(\mathbf{g}', \mathbf{f}) + \{2\mu \mathcal{H} + \sigma [2A'(0) - \\ - 2\mu^2 N_3]\} G_{11}(\mathbf{g}, \mathbf{f}) - \sum_{\mathbf{g}'} \sigma [2A(\mathbf{g} - \mathbf{g}') - \\ - \frac{\mu^2}{N} (N_1 + N_2)] G_{11}(\mathbf{g}', \mathbf{f}), \quad (31.26)$$

$$i \frac{\partial G_{21}(\mathbf{g}, \mathbf{f}, t)}{\partial t} = -\frac{\sigma \mu^2}{N} (N_1 - N_2) \sum_{\mathbf{g}'} G_{11}(\mathbf{g}', \mathbf{f}) - \\ - \{2\mu \mathcal{H} + \sigma [2A'(0) - 2\mu^2 N_3]\} G_{21}(\mathbf{g}, \mathbf{f}) + \\ + \sum_{\mathbf{g}'} \sigma [2A(\mathbf{g} - \mathbf{g}') - \frac{\mu^2}{N} (N_1 + N_2)] G_{21}(\mathbf{g}', \mathbf{f}).$$

Производя обычное преобразование Фурье

$$G_{11}(\mathbf{g}, \mathbf{f}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{g}-\mathbf{f}, \mathbf{k})} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_{11}(\mathbf{k}, E) e^{-iEt}, \\ G_{21}(\mathbf{g}, \mathbf{f}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{g}-\mathbf{f}, \mathbf{k})} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_{21}(\mathbf{k}, E) e^{-iEt}, \quad (31.27)$$

получим алгебраическую систему

$$[E - W'(\mathbf{k})] G_{11}(\mathbf{k}, E) - \Delta(\mathbf{k}) \sigma \mu^2 (N_1 - N_2) G_{21}(\mathbf{k}, E) = -\frac{\sigma}{2\pi}, \quad (31.28)$$

$$\Delta(\mathbf{k}) \sigma \mu^2 (N_1 - N_2) G_{11}(\mathbf{k}, E) + [E + W'(\mathbf{k})] G_{21}(\mathbf{k}, E) = 0.$$

Здесь

$$W'(\mathbf{k}) = 2\mu (\mathcal{H} - \sigma \mu N_3) + \\ + \sigma [2A'(0) - 2A'(\mathbf{k})] + \sigma \mu^2 (N_1 + N_2) \Delta(\mathbf{k}). \quad (31.29)$$

Система (31.28) решается отдельно для $k \neq 0$ и для $k = 0$.

При $k \neq 0$ мы имеем из (31.28)

$$[E - W'(k)] G_{11}(k; E) = -\frac{\sigma}{2\pi}, \quad G_{21}(k, E) = 0, \quad (31.30)$$

$$W'(k) = 2\mu(\mathcal{H} - \sigma\mu N_3) + \sigma[2A'(0) - 2A'(k)].$$

Далее по найденной функции $G_{11}(k, E)$ строим уравнение для оставшейся пока неизвестной величины σ . В полной аналогии с (29.19) получаем

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \text{cth} \frac{\beta W'(k)}{2} dk. \quad (31.31)$$

Нетрудно убедиться, что это уравнение, как и (29.19), обладает достаточно хорошими интерполяционными свойствами и может быть использовано для всех температур. Величина $W'(k)$ определяет спектр элементарных возбуждений в системе и не может быть отрицательной (предположение о возможности отрицательных значений $W'(k)$ ведет к противоречию: $n < 0$). Поэтому решение (31.30) возможно лишь, если $W'(k) \geq 0$ для всех k . Так как второе слагаемое в $W'(k)$ неотрицательно, рассмотренное решение имеет место лишь в достаточно сильных полях:

$$\mathcal{H} - \sigma\mu N_3 \geq 0. \quad (31.32)$$

Это обстоятельство имеет ясный физический смысл: внешнее поле должно «преодолевать» размагничивающее действие концов образца.

Пусть теперь $k = 0$. Тогда система (31.28) принимает вид

$$(E - E_0) G_{11}(0, E) - \sigma\mu^2(N_1 - N_2) G_{21}(0, E) = -\frac{\sigma}{2\pi}, \quad (31.33)$$

$$\sigma\mu^2(N_1 - N_2) G_{11}(0, E) + (E + E_0) G_{21}(0, E) = 0,$$

причем

$$E_0 = 2\mu\mathcal{H} + \sigma\mu^2(N_1 + N_2 - 2N_3). \quad (31.34)$$

Отсюда легко находим

$$G_{11}(0, E) = -\frac{\sigma}{2\pi} \cdot \frac{E_0 + E}{E^2 - E_r^2}, \quad G_{21}(0, E) = \frac{\sigma}{2\pi} \cdot \frac{\sigma\mu^2(N_1 - N_2)}{E^2 - E_r^2}, \quad (31.35)$$

и аналогично

$$G_{22}(0, E) = -\frac{\sigma}{2\pi} \cdot \frac{E_0 - E}{E^2 - E_r^2}, \quad G_{12}(0, E) = G_{21}(0, E). \quad (31.35a)$$

Здесь введено обозначение

$$E_r = \sqrt{A_1 A_2} \equiv 2\mu \sqrt{\{\mathcal{H} + \sigma\mu(N_1 - N_3)\} \{\mathcal{H} + \sigma\mu(N_2 - N_3)\}}. \quad (31.36)$$

Подставляя теперь выражения (31.35), (31.35a) в формулы (31.9) и пользуясь, как и раньше, равенством (31.20), получим окончательные выражения для компонент тензора восприимчивости

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta} &= \chi'_{\alpha\beta} + i\chi''_{\alpha\beta}, \quad \chi_{12} = -\chi_{21}, \quad \chi_0 = \frac{2\sigma\mu^2}{E_r}, \\ \chi'_{11} &= \chi_0 \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} \mathcal{P} \frac{1}{1 - \omega^2/E_r^2}, \quad \chi''_{11} = \frac{\pi\chi_0}{2} A_2 \delta(\omega - E_r), \\ \chi'_{21} &= \frac{\pi\chi_0}{2} E_r \delta(\omega - E_r), \quad \chi''_{21} = -\frac{\omega\chi_0}{E_r} \mathcal{P} \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{E_r^2}}, \\ \chi'_{22} &= \chi_0 \sqrt{\frac{A_1}{A_2}} \mathcal{P} \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{E_r^2}}, \quad \chi''_{22} = \frac{\pi\chi_0}{2} A_1 \delta(\omega - E_r). \end{aligned} \quad (31.37)$$

Величина χ'' характеризует поглощение энергии радиочастотного поля спиновой системой. В рассмотренном приближении это поглощение имеет место при частоте радиочастотного поля $\omega = E_r$; при этом одновременно происходит наиболее сильное «раскачивание» системы спинов радиочастотным полем. Иначе говоря, имеет место резонанс при совпадении частоты внешнего поля ω с собственной частотой системы E_r .

Первые расчеты значения резонансной частоты с учетом влияния факторов размагничивания (т. е. N_i) были выполнены Киттелем [13], который получил следующую формулу (в наших обозначениях):

$$E_r = 2\mu \sqrt{\{\mathcal{H} + \mu(N_1 - N_3)\} \{\mathcal{H} + \mu(N_2 - N_3)\}}. \quad (31.38)$$

Значения резонансных частот, рассчитанные по этой формуле, оказались в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Формула (31.36) представляет собой обобщение формулы Киттеля (31.38) на случай произвольных температур.

Следует заметить, что форма линий ферромагнитного резонанса оказалась у нас дельтаобразной. Это связано с тем, что в рассматриваемом приближении функции Грина имеют только полюсы на вещественной оси, и затухание возбуждений отсутствует. Учет затухания, необходимый для рассмотрения формы и ширины резонансной линии, требует перехода к более высоким приближениям (процессам рассеяния спиновых волн друг на друге). Следует, однако, иметь в виду, что фактически затухание спиновых волн (и, следовательно, уширение линии поглощения) связано еще с целым рядом других факторов — магнитной анизотропией кристалла, взаимодействием спиновых волн с фононами, электронами проводимости и т. д. Вопрос о доминирующем механизме затухания пока еще не вполне ясен.

§ 32. Общие соотношения для ферромагнитного резонанса ¹⁾

В предыдущем параграфе мы применили метод функций Грина к теории ферромагнитного резонанса. Выражения для восприимчивости χ были записаны через гриновские функции для данного гамильтониана спиновой системы H_0 . При конкретных вычислениях там были использованы определенные модельные представления относительно гамильтониана спиновой системы H_0 , и, кроме того, сделаны некоторые аппроксимации, связанные с расщеплением уравнений для функций Грина.

Ниже мы рассмотрим вопрос о ферромагнитном резонансе в линейном приближении в более общей постановке и постараемся получить некоторые сведения относительно поведения восприимчивости при возможно более общих предположениях о гамильтониане H_0 самой спиновой системы. При этом мы будем опираться лишь на аналитические свойства запаздывающих функций Грина, через которые выражается величина χ , и на вид оператора взаимодействия спиновой системы с радиочастотным полем. Ограничимся прежней постановкой задачи,

¹⁾ См. [14].

считая, что постоянное поле направлено по оси z , а радиочастотное (плоскополяризованное) расположено в плоскости xu . Нетрудно, далее, заметить, что формулы (31.9) для восприимчивости не ограничены какими-либо специальными предположениями о виде гамильтониана спиновой системы.

Для последующего удобно переписать гамильтониан взаимодействия (31.4) в несколько ином виде:

$$\Delta H(x_0) = \sum_{\omega > 0} e^{-\varepsilon |x_0|} \{V_{\omega} e^{-i\omega x_0} + \bar{V}_{\omega} e^{i\omega x_0}\}, \quad (32.1)$$

где

$$V_{\omega} = -\mu \sum_{\alpha, f} h_{\alpha}(\omega) S_{\alpha}(x_0, f); \quad \bar{V}_{\omega} = V_{-\omega}.$$

Тогда согласно (14.10) для приращения среднего значения вектора намагниченности (31.14)

$$M_i = \mu \sum_f S_i(x_0, f)$$

будем иметь следующее выражение:

$$\delta \tilde{M}_{\alpha}(x_0) = \sum_{\beta, \omega > 0} \{X_{\alpha\beta}(\omega) h_{\beta}(\omega) e^{-i\omega x_0} + X_{\alpha\beta}(-\omega) \bar{h}_{\beta}(\omega) e^{i\omega x_0}\}. \quad (32.2)$$

Здесь компоненты $X_{\alpha\beta}$ связаны с $\chi_{\alpha\beta}$, которые даются формулами (31.9) очевидными соотношениями

$$X_{\alpha\beta} = \sum_g \chi_{\alpha\beta}(\omega, g). \quad (32.3)$$

Особенности отдельных задач (вид гамильтониана, форма образца и др.) входят согласно (31.9) через функции $G_{\alpha\beta}$. В этом параграфе мы не будем касаться вопроса об их непосредственном определении, а займемся вместо этого выяснением общих свойств тензора восприимчивости, не связанных со специализацией задачи.

Введем вместо операторов $b(f)$, $\bar{b}(f)$ новые операторы

$$B = \sum_f b(f), \quad \bar{B} = \sum_f \bar{b}(f), \quad N = \sum_f \bar{b}(f) b(f) \quad (32.4)$$

и соответственно функции Грина

$$\begin{aligned} G_{11}(E) &= \langle \langle B | \bar{B} \rangle \rangle_E^{(-)}, & G_{12}(E) &= \langle \langle B | B \rangle \rangle_E^{(-)}, \\ G_{21}(E) &= \langle \langle \bar{B} | \bar{B} \rangle \rangle_E^{(-)}, & G_{22}(E) &= \langle \langle \bar{B} | B \rangle \rangle_E^{(-)}. \end{aligned} \quad (32.5)$$

Здесь E — комплексная переменная. В формулах (32.5) не указано, с какой именно функцией Грина мы имеем дело, так как в комплексной плоскости запаздывающую и опережающую функции можно рассматривать как единую аналитическую функцию (см. § 3). Лишь при вещественных значениях E ($E = \omega$) их нужно различать, для чего и будет служить индекс r сверху.

Перепишем теперь тензор восприимчивости X в стандартном виде

$$X(\omega) = \begin{pmatrix} X_1(\omega) + X_2(\omega) & i[\gamma_1(\omega) + \gamma_2(\omega)] & 0 \\ -i[\gamma_1(\omega) - \gamma_2(\omega)] & X_1(\omega) - X_2(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & X_0 \end{pmatrix}. \quad (32.6)$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} X_1(\omega) &= u \{G_{11}^r(\omega) + G_{22}^r(\omega)\}, & X_2 &= u \{G_{12}^r(\omega) + G_{21}^r(\omega)\}, \\ \gamma_1(\omega) &= u \{G_{11}^r(\omega) - G_{22}^r(\omega)\}, & \gamma_2(\omega) &= u \{-G_{12}^r(\omega) + G_{21}^r(\omega)\}, \\ & & u &= 2\pi\mu^2. \end{aligned} \quad (32.7)$$

Примем теперь во внимание, что для функций Грина данного вида при вещественных значениях аргумента ($E = \omega$) справедливо соотношение

$$\langle \langle A | B \rangle \rangle_\omega^r = \overline{\langle \langle \bar{A} | \bar{B} \rangle \rangle_{-\omega}^r}.$$

Следовательно,

$$G_{11}^r(\omega) = \bar{G}_{22}^r(-\omega), \quad G_{12}^r(\omega) = \bar{G}_{21}^r(-\omega). \quad (32.8)$$

Используя (32.7) и (32.8), получаем известные соотношения [15], [16]

$$X_{\alpha\beta}(\omega) = \bar{X}_{\alpha\beta}(-\omega), \quad (32.9)$$

$$\begin{aligned} X_1(\omega) &= \bar{X}_1(-\omega), & X_2(\omega) &= \bar{X}_2(-\omega), \\ \gamma_1(\omega) &= -\bar{\gamma}_1(-\omega), & \gamma_2(\omega) &= -\bar{\gamma}_2(-\omega). \end{aligned} \quad (32.10)$$

В работе [16] этот результат был получен с помощью метода, весьма близкого к методу функций Грина (подробнее см. § 14 и обзор [17]).

Для вещественных ($X'_{\alpha\beta}$) и мнимых ($X''_{\alpha\beta}$) частей восприимчивости получаем отсюда

$$X'_{\alpha\beta}(\omega) = X'_{\alpha\beta}(-\omega), \quad X''_{\alpha\beta}(\omega) = -X''_{\alpha\beta}(-\omega), \quad (32.11)$$

$$X'_{12}(\omega) = X'_{12}(-\omega), \quad X''_{12}(\omega) = -X''_{12}(-\omega), \quad (32.12)$$

$$Y'_{12}(\omega) = -Y'_{12}(-\omega), \quad Y''_{12}(\omega) = Y''_{12}(-\omega). \quad (32.13)$$

Предположим теперь, что уравнения движения для операторов B , $\bar{B}$ допускают инверсию времени, т. е. инвариантны относительно преобразования

$$t \rightarrow -t, \quad i \rightarrow -i. \quad (32.14)$$

Тогда, помимо всегда справедливых равенств (32.8) и вытекающих из них формул (32.9) — (32.13), появляется еще одно соотношение, связывающее компоненты $G_{\alpha\beta}^r$. Именно, при вещественных E мы имеем

$$\langle\langle A | B \rangle\rangle_{\omega}^r = \langle\langle \bar{B} | \bar{A} \rangle\rangle_{\omega}^r.$$

Следовательно,

$$G_{12}^r(\omega) = G_{21}^r(\omega) \quad (32.15)$$

и, далее,

$$Y_2(\omega) = 0, \quad X_2(\omega) = 2iG_{12}^r(\omega). \quad (32.16)$$

Рассмотрим более подробно поведение восприимчивости в области резонанса. Оно определяется, очевидно, в основном полюсами функций $G_{\alpha\beta}$ (32.5). Поэтому будем далее рассматривать функции $G_{\alpha\beta}$ в комплексной плоскости.

Следуя работе [14], введем матрицу $G(E)$:

$$G(E) = \begin{pmatrix} G_{11}(E) & G_{12}(E) \\ G_{21}(E) & G_{22}(E) \end{pmatrix}, \quad (32.17)$$

где величины $G_{\alpha\beta}$ определяются формулами (32.5).

В комплексной плоскости для функций Грина имеет место соотношение типа (5.8)

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle_E = \langle\langle B|A\rangle\rangle_{-E}.$$

И, следовательно, для элементов матрицы (32.17) имеем

$$G_{11}(E) = G_{22}(-E), \quad G_{12}(E) = G_{12}(-E). \quad (32.18)$$

Введем матрицу F , обратную матрице G . Нетрудно показать, что ее элементы $F_{\alpha\beta}(E)$ связаны соотношениями вида (32.18). Выразим теперь $G_{\alpha\beta}$ через $F_{\alpha\beta}$:

$$G_{11}(E) = \frac{F_{22}(E)}{\Delta(E)}, \quad G_{12}(E) = -\frac{F_{12}(E)}{\Delta(E)}, \quad (32.19)$$

где

$$\Delta(E) = F_{11}(E)F_{22}(E) - F_{12}(E)F_{21}(E) = \Delta(-E). \quad (32.20)$$

Пусть функция $G(E)$ имеет полюс в точке $E = E_R$. Так как $F(E)$ в этой точке регулярна, то E_R есть корень уравнения $\Delta(E) = 0$. Но согласно (32.20) и $-E_R$ будет корнем этого уравнения. Следовательно,

$$\Delta(E) = (E^2 - E_R^2) A(E), \quad A(-E) = A(E), \quad (32.21)$$

где $A(E)$ — некоторая функция от E .

Полагая далее по определению

$$F_{11}(E) = F_{22}(-E) \equiv F(E), \quad (32.22)$$

$$F_{12}(E) = F_{12}(-E) \equiv \Phi_1(E), \quad F_{21}(E) = F_{21}(-E) \equiv \Phi_2(E),$$

и используя (32.21), получаем из формул (32.19)

$$\begin{aligned} G_{11}(E) &= \frac{F(-E)}{2E_R A(E)} R(E), \\ G_{12}(E) &= -\frac{\Phi_1(E)}{2E_R A(E)} R(E), \dots \end{aligned} \quad (32.23)$$

где

$$R(E) = \frac{1}{E - E_R} - \frac{1}{E + E_R}. \quad (32.24)$$

Подставим (32.23) в формулы (32.7) для величин $X_1(E), \dots$

В результате будем иметь

$$\begin{aligned} X_1(E) &= u \frac{F(-E) + F(E)}{2E_R A(E)} R(E), \\ X_2(E) &= -u \frac{\Phi_1(E) + \Phi_2(E)}{2E_R A(E)} R(E), \\ Y_1(E) &= u \frac{F(-E) - F(E)}{2E_R A(E)} R(E), \\ Y_2(E) &= u \frac{\Phi_1(E) - \Phi_2(E)}{2E_R A(E)} R(E), \end{aligned} \quad (32.25)$$

где R и A определяются формулами (32.24) и (32.21).

Величины $X_1, \dots, Y_2$ связаны в силу (33.19), (32.20) соотношением

$$X_1^2(E) - X_2^2(E) - Y_1^2(E) + Y_2^2(E) = \frac{(4\pi\mu^2)^2}{2E_R A(E)} R(E), \quad (32.26)$$

или

$$X_{11}(E) X_{22}(E) - X_{12}(E) X_{21}(E) = \frac{(4\pi\mu^2)^2}{2E_R A(E)} R(E). \quad (32.27)$$

Рассмотрим теперь поведение $X_1(E)$ при E , близких к E_R . Замечая, что множители при $R(E)$ в формулах (32.25) являются регулярными функциями E при E , достаточно близких к E_R , произведем в них замену E на E_R . Ошибка при этом будет невелика, так как, выделив $R(E)$, мы учли особенности точно. Тогда для E близких к E_R можем приближенно записать формулы (32.25) следующим образом:

$$X_1(E) \approx u \frac{F(-E_R) + F(E_R)}{2E_R A(E_R)} R(E), \dots$$

Далее, принимая во внимание, что

$$\Delta(E_R) = F(-E_R) F(E_R) - \Phi_1(E_R) \Phi_2(E_R) = 0,$$

получаем окончательно

$$\begin{aligned} X_1(E) &\approx C(1 + K_1 K_2) R(E), & X_2(E) &\approx -C(K_1 + K_2) R(E), \\ Y_1(E) &\approx C(1 - K_1 K_2) R(E), & Y_2(E) &\approx C(K_1 - K_2) R(E). \end{aligned} \quad (32.28)$$

Здесь введены обозначения

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= \frac{\Phi_1(E_R)}{F(-E_R)}, \\ K_2 &= \frac{\Phi_2(E_R)}{F(-E_R)}, \\ C &= u \frac{F(-E_R)}{2E_R A(E_R)}. \end{aligned} \right\} \quad (32.29)$$

Если уравнения движения для операторов B , $\bar{B}$ допускают инверсию времени (32.14), то

$$\Phi_2(E) = \Phi_1(E), \quad K_2 = K_1, \quad Y_2 = 0. \quad (32.30)$$

Формулы (32.7) определяют магнитную восприимчивость через значения запаздывающих функций Грина на вещественной оси. Получим теперь формулы, соответствующие (32.25) — (32.30) для вещественных E и E_R .

Прежде всего примем во внимание соотношения (32.8). Далее, рассуждая аналогично предыдущему, получим

$$\begin{aligned} G_{11}^r(\omega) &= \frac{F_{22}^r(\omega)}{\Delta_r(\omega)} = \frac{\bar{F}^r(-\omega)}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \\ G_{12}^r(\omega) &= \frac{-F_{21}^r(\omega)}{\Delta_r(\omega)} = \frac{-\bar{\Phi}^r(-\omega)}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \dots, \end{aligned} \quad (32.31)$$

где

$$\Delta_r(\omega) = F^r(\omega) \bar{F}^r(-\omega) - \Phi^r(\omega) \bar{\Phi}^r(-\omega), \quad (32.32)$$

$$\Delta_r(\omega) = \bar{\Delta}_r(-\omega) = (\omega^2 - \omega_R^2) A_r(\omega), \quad A_r(\omega) = \bar{A}_r(-\omega),$$

$$R_r(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_R + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega + \omega_R + i\varepsilon} \right\} \quad (32.33)$$

и где ω_R — полюс функции G на вещественной оси. Наконец, величины

$$F^r(\omega) \equiv F_{11}^r(\omega) = \bar{F}_{22}^r(-\omega), \quad \Phi^r(\omega) \equiv F_{12}^r(\omega) = \bar{F}_{21}^r(-\omega) \quad (32.34)$$

суть элементы матрицы $F_{\alpha\beta}(\omega)$.

В результате получаем

$$\begin{aligned} X_1(\omega) &= u \frac{F^r(\omega) + \bar{F}^r(-\omega)}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \\ X_2(\omega) &= -u \frac{\Phi^r(\omega) + \bar{\Phi}^r(-\omega)}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \\ Y_1(\omega) &= -u \frac{-F^r(\omega) + \bar{F}^r(-\omega)}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \\ Y_2(\omega) &= u \frac{\Phi^r(\omega) - \bar{\Phi}^r(-\omega)}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \end{aligned} \quad (32.35)$$

$$X_1^2(\omega) - X_2^2(\omega) - Y_1^2(\omega) + Y_2^2(\omega) = \frac{(4\pi\mu^2)^2}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \quad (32.36)$$

$$X_{11}(\omega) X_{22}(\omega) - X_{12}(\omega) X_{21}(\omega) = \frac{(4\pi\mu^2)^2}{2\omega_R A^r(\omega)} R_r(\omega), \quad (32.37)$$

и приближенно для области резонанса

$$X_1(\omega) \approx C(1 + K_1 K_2) R^r(\omega), \quad X_2(\omega) \approx -C(K_1 + K_2) R^r(\omega), \quad (32.38)$$

$$Y_1(\omega) \approx C(1 - K_1 K_2) R^r(\omega), \quad Y_2(\omega) \approx C(K_1 - K_2) R^r(\omega),$$

где C, K_1, K_2 — постоянные, определяемые по формулам

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= \frac{\Phi^r(\omega_R)}{\bar{F}^r(-\omega_R)}, \\ K_2 &= \frac{\bar{\Phi}^r(-\omega_R)}{\bar{F}^r(-\omega_R)}, \\ C &= u \frac{\bar{F}^r(-\omega_R)}{2\omega_R A^r(\omega_R)}. \end{aligned} \right\} \quad (32.39)$$

Точно так же, если уравнения движения для операторов $B, \bar{B}$ допускают преобразование (32.14), то

$$\bar{\Phi}_r(\omega) = \Phi_r(-\omega), \quad K_1 = K_2, \quad Y_2(\omega) = 0. \quad (32.40)$$

Энергия, поглощаемая спиновой системой из радиочастотного поля за единицу времени, численно равна работе,

совершаемой радиочастотным полем над системой за единицу времени. Эта работа может быть определена как

$$\frac{d\tilde{A}(x_0)}{dx_0} = \sum_{\alpha} h_{\alpha}(x_0) \frac{d}{dx_0} \delta \tilde{M}_{\alpha}(x_0),$$

или согласно (32.1), (32.2)

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{A}(x_0)}{dx_0} = & -i \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \omega, \omega' > 0}} \omega' \{ h_{\alpha}(\omega) e^{-i\omega x_0} + \bar{h}_{\alpha}(\omega) e^{i\omega x_0} \} \times \\ & \times \{ X_{\alpha\beta}(\omega') h_{\beta}(\omega') e^{-i\omega' x_0} - X_{\alpha\beta}(-\omega') \bar{h}_{\beta}(\omega') e^{i\omega' x_0} \}. \end{aligned}$$

Отсюда, принимая во внимание (32.9), находим выражение для средней энергии, поглощаемой системой в единицу времени:

$$\begin{aligned} \omega = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{d\tilde{A}(x_0)}{dx_0} dx_0 = \\ = i \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \omega > 0}} \omega \{ \bar{X}_{\alpha\beta}(\omega) h_{\alpha}(\omega) \bar{h}_{\beta}(\omega) - X_{\alpha\beta}(\omega) \bar{h}_{\alpha}(\omega) h_{\beta}(\omega) \}. \end{aligned} \quad (32.41)$$

Для случая плоскополяризованного поля, рассматривавшегося в этом и предыдущем параграфах, мы должны выбрать, например,

$$\bar{h}_{\alpha}(\omega) = h_{\alpha}(\omega), \quad \alpha = 1, 2.$$

Тогда формула (32.41) принимает вид

$$\begin{aligned} \omega = i \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \omega > 0}} \omega \{ \bar{X}_{\alpha\beta}(\omega) - X_{\alpha\beta}(\omega) \} h_{\alpha}(\omega) h_{\beta}(\omega) = \\ = \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \omega > 0}} 2\omega X''_{\alpha\beta}(\omega) h_{\alpha}(\omega) h_{\beta}(\omega). \end{aligned} \quad (32.42)$$

Несколько иной вывод этой формулы имеется в работах [15], [16] и [18]. Отсюда следует известный вывод о том, что поглощение энергии радиочастотного поля определяется мнимой частью тензора восприимчивости. В окрестности полюсов функций Грина величины $X_{\alpha\beta}$ резко возрастают, и поглощение энергии носит резонансный характер.

Из предыдущих результатов видим, что ряд сведений относительно поведения магнитной восприимчивости при ферромагнитном резонансе можно получить без какой-либо специальной информации о гамильтониане спиновой системы. Попробуем теперь включить в рассмотрение затухание в спиновой системе. В соответствии с этим предположим, что в некотором приближении рассматриваемые функции Грина имеют полюсы E_R в комплексной плоскости. (Это может быть верно лишь приближенно и отнюдь не всегда, так как вообще функции Грина могут иметь особенности и более сложной природы.) Пусть $\Gamma = \text{Im } E_R$, тогда, очевидно, Γ будет представлять затухание в спиновой системе для процессов, описываемых с помощью введенных нами функций Грина (см. § 3). Принимая во внимание, что при $\Gamma \rightarrow 0$ соответствующие формулы должны переходить в формулы (32.31) — (32.33), предположим, что сингулярная функция (32.33) имеет вид

$$\begin{aligned} R^r(\omega) &= \frac{1}{\omega - \omega_R + i\Gamma} - \frac{1}{\omega + \omega_R + i\Gamma} = \\ &= 2\omega_R \frac{\omega^2 - \omega_R^2 - \Gamma^2 - 2i\omega\Gamma}{(\omega^2 - \omega_R^2 - \Gamma^2)^2 + (2\omega\Gamma)^2}. \end{aligned} \quad (32.43)$$

Подставляя (32.43) в (32.38), приходим к результатам классической теории ширины линии ферромагнитного резонанса [19]. Разница состоит лишь в том, что в классической теории предполагается существование «члена с трением» в уравнениях движения [19], [20], а здесь предполагается существование особенностей определенного вида у функций Грина.

І. НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

В этом приложении мы изложим элементы техники квантовой теории поля, знакомство с которыми желательно для ясного понимания основного текста книги. Следует, однако, иметь в виду, что здесь дается не подробное изложение теории, а лишь более или менее конспективная сводка некоторых ее результатов.

а) Представление взаимодействия и матрица рассеяния

Рассмотрим динамическую систему с гамильтонианом

$$H = H_0 + H_1, \quad (I.1)$$

причем оператор H_0 не зависит явно от времени. Собственные значения и собственные функции H_0 будем считать известными (нумеруя их в случае необходимости символом n). Уравнение движения для волновой функции всей системы в представлении Шредингера имеет вид¹⁾

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial x_0} = \hat{H} \Phi. \quad (I.2)$$

Произведем каноническое преобразование с помощью унитарного оператора $U = e^{-i\hat{H}_0 x_0}$, полагая

$$\hat{\Phi}(x_0) = e^{-i\hat{H}_0 x_0} \Phi'(x_0). \quad (I.3)$$

¹⁾ Операторы в представлении Шредингера снабжаются значком $\wedge$ сверху; тем же значком мы будем отмечать и волновые функции в этом представлении.

Из предыдущих результатов видим, что ряд сведений относительно поведения магнитной восприимчивости при ферромагнитном резонансе можно получить без какой-либо специальной информации о гамильтониане спиновой системы. Попытаемся теперь включить в рассмотрение затухание в спиновой системе. В соответствии с этим предположим, что в некотором приближении рассматриваемые функции Грина имеют полюсы E_R в комплексной плоскости. (Это может быть верно лишь приближенно и отнюдь не всегда, так как вообще функции Грина могут иметь особенности и более сложной природы.) Пусть $\Gamma = \text{Im } E_R$, тогда, очевидно, Γ будет представлять затухание в спиновой системе для процессов, описываемых с помощью введенных нами функций Грина (см. § 3). Принимая во внимание, что при $\Gamma \rightarrow 0$ соответствующие формулы должны переходить в формулы (32.31)—(32.33), предположим, что сингулярная функция (32.33) имеет вид

$$\begin{aligned} R^r(\omega) &= \frac{1}{\omega - \omega_R + i\Gamma} - \frac{1}{\omega + \omega_R + i\Gamma} = \\ &= 2\omega_R \frac{\omega^2 - \omega_R^2 - \Gamma^2 - 2i\omega\Gamma}{(\omega^2 - \omega_R^2 - \Gamma^2)^2 + (2\omega\Gamma)^2}. \end{aligned} \quad (32.43)$$

Подставляя (32.43) в (32.38), приходим к результатам классической теории ширины линии ферромагнитного резонанса [19]. Разница состоит лишь в том, что в классической теории предполагается существование «члена с трением» в уравнениях движения [19], [20], а здесь предполагается существование особенностей определенного вида у функций Грина.

1. НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

В этом приложении мы изложим элементы техники квантовой теории поля, знакомство с которыми желательно для ясного понимания основного текста книги. Следует, однако, иметь в виду, что здесь дается не подробное изложение теории, а лишь более или менее конспективная сводка некоторых ее результатов.

а) Представление взаимодействия и матрица рассеяния

Рассмотрим динамическую систему с гамильтонианом

$$H = H_0 + H_1, \quad (1.1)$$

причем оператор H_0 не зависит явно от времени. Собственные значения и собственные функции H_0 будем считать известными (нумеруя их в случае необходимости символом n). Уравнение движения для волновой функции всей системы в представлении Шредингера имеет вид¹⁾

$$i \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial x_0} = \hat{H} \hat{\Phi}. \quad (1.2)$$

Произведем каноническое преобразование с помощью унитарного оператора $U = e^{-i\hat{H}_0 x_0}$, полагая

$$\hat{\Phi}(x_0) = e^{-i\hat{H}_0 x_0} \Phi'(x_0). \quad (1.3)$$

¹⁾ Операторы в представлении Шредингера снабжаются значком $\hat{}$ сверху; тем же значком мы будем отмечать и волновые функции в этом представлении.

Тогда для Φ' — волновой функции в новом представлении — получим уравнение

$$i \frac{\partial \Phi'}{\partial x_0} = e^{i\hat{H}_0 x_0} \hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0 x_0} \Phi',$$

т. е.

$$i \frac{\partial \Phi'}{\partial x_0} = H'_1(x_0) \Phi', \quad (1.4)$$

$$H'_1(x_0) = e^{i\hat{H}_0 x_0} \hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0 x_0}. \quad (1.5)$$

Очевидно, формулами типа (1.5) будут определяться и все прочие динамические переменные в новом представлении (указываемом штрихом при операторах и волновых функциях). Оно носит название представления взаимодействия. Название связано с тем, что в применениях оператор $\hat{H}_0$ обычно описывает систему свободных частиц, а $\hat{H}_1$ — взаимодействие между ними. Видно, что волновая функция системы в этом представлении меняется со временем лишь за счет оператора H'_1 . С другой стороны, динамические переменные подчиняются гейзенберговским уравнениям движения с гамильтонианом H_0 . Решение уравнения (1.4) будем искать в виде

$$\Phi'(x_0) = S'(x_0) \Phi'(-\infty), \quad (1.6)$$

где $S'(x_0)$ — так называемый оператор рассеяния (матрица рассеяния, S -матрица). Очевидно,

$$i \frac{\partial S'(x_0)}{\partial x_0} = H'_1(x_0) S'(x_0). \quad (1.7)$$

В силу (1.6) волновые функции системы при $x_0 \rightarrow -\infty$ и $x_0 \rightarrow +\infty$ связаны соотношением

$$\Phi'(\infty) = S'(\infty) \Phi'(-\infty). \quad (1.8)$$

Таким образом, величина $S'(\infty)$ (обозначаемая обычно просто через S') определяет вероятности всех возможных переходов в системе, эффективные сечения рассеяния и т. д. В теории рассеяния частиц, когда оператор H'_1 описывает взаимодействие между ними и рассеивающей системой, естественно считать, что взаимодействие медленно (адиабатически) включается и выключается в начале и конце процесса (при $x_0 \rightarrow -\infty$ и $x_0 \rightarrow +\infty$): $H'_1 \sim e^{-\varepsilon|x_0|}$. При этом $\Phi'(-\infty)$

совпадает с соответствующей волновой функцией Φ в представлении Гейзенберга для задачи с $H'_1 = 0$. В этом смысле можно сказать, что $S'(x_0)$ есть унитарный оператор, осуществляющий переход от представления Гейзенберга к представлению взаимодействия

$$\Phi'(\infty) = S'(\infty) \Phi, \quad A'(x_0) = S'(x_0) A(x_0) \bar{S}'(x_0), \quad (I.9)$$

где A — любой оператор.

Соотношения (I.9) позволяют, в частности, получить выражения для произвольной функции Грина в представлении взаимодействия. Рассмотрим для этого матричный элемент вида

$$M_n = (\Phi_n, T\{C_1(x) C_2(x')\} \Phi_n). \quad (I.10)$$

Переходя к представлению взаимодействия с помощью формул (I.9), получаем

$$M_n = (\Phi'_n, T\{C'_1(x) C'_2(x') S'(\infty)\} S'^{-1}(\infty) \Phi'_n). \quad (I.11)$$

Вообще говоря, выражение $S'^{-1}(\infty) \Phi'_n$ может представлять собой линейную комбинацию волновых функций самых различных стационарных состояний. Допустим, однако, что по какой-либо причине

$$S'^{-1}(\infty) \Phi'_n = a_n \Phi'_n, \quad |a_n| = 1, \quad (I.12)$$

где a_n — некоторая постоянная. Тогда выражение (I.11) резко упрощается, принимая вид

$$M_n = a_n (\Phi'_n, T\{C'_1(x) C'_2(x') S'(\infty)\} \Phi'_n).$$

Константу a_n легко найти, усредняя (I.12) по состоянию Φ'_n :

$$a_n = (\Phi'_n, S'(\infty) \Phi'_n)^{-1}. \quad (I.13)$$

В частности, если равенство (I.12) имеет место для всех n , то произвольную причинную функцию Грина можно представить в виде

$$K_c(x, x') = i \langle T\{C'_1(x) C'_2(x') S'\} \rangle', \quad (I.14)$$

где усреднение по ансамблю производится с весом

$$p'_n = \frac{P_n}{(\Phi'_n, S'(\infty) \Phi'_n)}.$$

Заметим, однако, что выполнение равенства (I. 12) при всех n может иметь место лишь в некоторых тривиальных случаях. Действительно, это равенство означает, что возмущение H'_1 не вызывает в системе никаких реальных процессов, приводя лишь к изменению волновых функций на фазовые множители a_n . Поэтому формула (I. 14) обычно не имеет места. Исключение составляет случай $T=0$, когда усреднение в (3.17) производится лишь по основному состоянию системы. Эту операцию мы будем обозначать символом $\langle \dots \rangle_0$. Для волновой функции основного состояния равенство (I. 12) справедливо: взаимодействие дает лишь поправку к энергии основного состояния [см. ниже формулу (I. 30)]. Таким образом, при $T=0$ мы имеем

$$K_c(x, x') = \frac{i}{\langle S' \rangle_0} \langle T \{ C'_1(x) C'_2(x') S' \} \rangle_0. \quad (\text{I. 15})$$

Для матрицы рассеяния можно получить формально замкнутое выражение, интегрируя уравнение (I. 7) с начальным условием $S'(-\infty) = 1$. Следует лишь принять во внимание некоммутативность операторов $H'_1(x_0)$ и $H'_1(x'_0)$ при $x'_0 \neq x_0$. В силу этого обстоятельства нельзя написать решение (I. 7) в простом экспоненциальном виде

$$S'(x_0) = \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{x_0} H'_1(t) dt \right\}.$$

Легко убедиться, что правильная формула имеет вид

$$S'(x_0) = T \left\{ \exp \left(-i \int_{-\infty}^{x_0} H'_1(t) dt \right) \right\}, \quad (\text{I. 16})$$

где T — символ T -произведения, определенного равенствами (3.18). При этом существенно лишь то, что T -произведение операторов упорядочено по времени. Соглашение о знаках (3.18) при этом не играет роли, ибо в гамильтонианах, нас интересующих, фермиевские операторы фигурируют лишь

в билинейных (или четверных) комбинациях. Выбор знаков в (3.18) существен в другой связи (см. определение нормального произведения на стр. 268). Начальный момент можно было бы выбрать в любой точке x'_0 (не обязательно $x'_0 \rightarrow -\infty$). Тогда вместо (I.16) мы получили бы

$$S'(x_0, x'_0) = T \left\{ \exp \left(-i \int_{x'_0}^{x_0} H'_1(t) dt \right) \right\}. \quad (\text{I. 16a})$$

Если оператор $H'_1(x_0)$ не содержит производных по времени от функций поля, то $H'_1(x_0) = -L'_1(x_0)$, где L'_1 получается по образцу (I.5) из соответствующего лагранжиана взаимодействия. Тогда

$$S'(x_0) = T \left\{ \exp \left(i \int_{-\infty}^{x_0} L'_1(t) dt \right) \right\}. \quad (\text{I. 17})$$

Можно показать [1], что это выражение справедливо и в общем случае любого (локального) лагранжиана взаимодействия. Проще всего убедиться в этом, если строить S' -матрицу не с помощью уравнений движения, а непосредственно исходя из физических требований унитарности, причинности и ковариантности.

Формула (I.17) позволяет получить общее выражение для вероятности какого-либо перехода в системе (см. [2]). Именно, поскольку время входит в $H'_1(x_0)$ только в виде осциллирующих экспоненциальных множителей [см. (I.5)], можно утверждать, что матричные элементы $S'(\infty)$, вычисленные в системе собственных функций H'_0 , будут иметь вид

$$(\Phi_n, S'(\infty) \Phi_m) = -i U_{nm} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\nu t - \varepsilon |t|} dt = -2\pi i U_{nm} \delta(\nu). \quad (\text{I. 18})$$

Здесь U_{nm} — величина, не зависящая от времени, множитель $-i$ выделен для удобства, а ν — некоторая величина, которая, как легко убедиться, оказывается просто разностью энергий начального и конечного состояний. Множитель $e^{-\varepsilon |t|}$ учитывает условие адиабатического включения и выключения

взаимодействия. Вероятность перехода, отнесенная к единице времени, есть

$$w_{nm} = \frac{d}{dx_0} |(\Phi_n, S'(\infty) \Phi_m)|^2. \quad (I. 19)$$

Как правило, представляет интерес предельное значение w_{nm} при $x_0 \rightarrow \infty$. Соответственно введем величину

$$s'_{nm}(x_0) = -i U_{nm} \int_{-\infty}^{x_0} e^{i\nu t - \varepsilon |t|} dt,$$

которая совпадает с матричным элементом $(\Phi_n, S' \Phi_m)$ лишь в пределе при $x_0 \rightarrow \infty$. Выполняя интегрирование и пользуясь затем определением (I. 19), легко находим

$$w_{nm} = 2\pi |U_{nm}|^2 \delta(\nu). \quad (I. 20)$$

Величину U_{nm} иногда называют матрицей эффективной энергии возмущения.

б) Теория возмущений для S' -матрицы. Теорема Вика

Формулу (I. 17) еще нельзя сразу использовать для практических расчетов, ибо она содержит упорядочивающий символ T . Общих рецептов реализации операторов (I. 17) не существует; чаще всего пользуются просто разложением экспоненты в ряд, иногда — с последующим суммированием важнейших его членов. Мы рассмотрим здесь этот метод, представляющий собой просто теорию возмущений для S' -матрицы, применительно к гамильтониану (6.5), когда $H_{\text{int}} = 0$. Роль H'_1 здесь играет оператор взаимодействия частиц с квантовым полем

$$H'_1 \equiv H'_{pf} = -g \int dx \bar{a}'(x) \Gamma^{(0)} a'(x) \Phi'(x), \quad (I. 21)$$

а H'_0 есть сумма гамильтонианов свободных частиц и поля. Будем считать, что $\Gamma^{(0)}$ не содержит операторов дифференцирования по времени; тогда функция Лагранжа L'_1 дается правой частью (I. 21) с обратным знаком. Разлагая S' -матрицу

в ряд по степеням константы связи g , получаем из (I. 17)

$$S'(\infty) - 1 = ig \int dx \bar{a}'(x) \Gamma^{(0)} a'(x) \Phi'(x) - \frac{g^2}{2} \int dx dx' \times \\ \times T \{ \bar{a}'(x) \Gamma^{(0)} a'(x) \Phi'(x) \bar{a}'(x') \Gamma^{(0)} a'(x') \Phi'(x') \} + \dots \quad (\text{I. 22})$$

В первом порядке по константе связи в правой части (I. 22) остается лишь первое слагаемое. Оно, очевидно, описывает процессы испускания и поглощения бозевских квантов с одновременным изменением состояния одного из фермионов. Для того чтобы вычислить вероятность перехода по формуле (I. 20), надо обычным способом представить $\bar{a}'$, a' , Φ' как линейные комбинации операторов порождения и уничтожения частиц в интересующих нас состояниях и выбрать из получающейся таким путем суммы произведений интересующие нас члены. В данном — простейшем — случае это легко делается непосредственно.

Члены второго порядка в правой части (I. 22) описывают четыре группы процессов: а) без изменения состояния бозонов; б) без изменения состояния фермионов; в) с испусканием (или поглощением) двух бозонов в одном акте; г) с испусканием одного бозона и поглощением другого (в частности, это — рассеяние бозонов). В последних двух случаях, естественно, меняется и состояние ферми-частиц (одной или двух).

Для вычисления соответствующих вероятностей переходов можно было бы поступить так же, как в случае процессов первого порядка, однако здесь это привело бы уже к более длинным выкладкам. В дальнейшем при переходе к каждому новому приближению громоздкость выкладок возрастает в неимоверной степени. По этой причине необходимо сформулировать какие-то регулярные правила, которые позволили бы сразу выписать в нужном порядке матричный элемент S' для того или иного конкретного процесса. Соответствующие правила были сформулированы Фейнманом [3]. Математической основой их является так называемая теорема Вика [4], которую мы сейчас и рассмотрим.

Введем прежде всего понятие нормального произведения операторов ¹⁾. Будем говорить, что произведение элементарных

¹⁾ Здесь и в дальнейшем мы имеем в виду только представление взаимодействия.

(фермиевских или бозевских) операторов порождения и уничтожения частиц (квантов) расположено в нормальном порядке, если все операторы порождения стоят слева от операторов уничтожения. Пусть теперь мы имеем набор операторов $C'_1(x_1)$, $C'_2(x_2)$, ..., $C'_n(x_n)$, представляющих собой линейные комбинации элементарных операторов порождения и уничтожения. Чтобы получить нормальное произведение, надо явно перемножить операторы C'_1 , ..., C'_n и затем привести каждый член полученного выражения к нормальному порядку, считая при этом все коммутаторы бозевских и антикоммутаторы фермиевских операторов равными нулю. Иначе говоря, произведение операторов называется нормальным, если, независимо от порядка написания их на бумаге, все операторы порождения действуют на волновую функцию после операторов уничтожения. Принято обозначать нормальное произведение двоеточиями справа и слева от перемножаемых операторов.

Из определения явствует, что все бозевские операторы [в том числе и $a'(\lambda)$, $\bar{a}'(\lambda)$] под знаком нормального произведения коммутируют, а все фермиевские — антикоммутируют. Последнее обстоятельство есть в конце концов отражение принципа Паули, который при таком определении нормального произведения принимается во внимание наиболее простым и естественным путем.

Основная особенность нормального произведения операторов состоит в том, что вакуумное среднее от него равно нулю. В применении к теории твердого тела, как уже неоднократно указывалось, роль вакуума играет основное состояние системы. В отсутствие взаимодействия между частицами основное состояние системы таково, что одна часть уровней целиком заполнена, а другая — полностью свободна. Это позволяет очевидным образом ввести операторы порождения и уничтожения возбуждений, по отношению к которым и надо определять нормальное произведение. Обычно операторы $\bar{a}'$ и a' , фигурирующие в (I. 21) представляют собой линейные комбинации операторов порождения и уничтожения возбуждений. Чтобы не загромождать изложения, мы будем в дальнейшем говорить просто об операторах $\bar{a}'$ и a' , лишь подразумевая изменения, которые надлежит ввести при такой замене. Для операторов порождения и уни-

чтожения возбуждений основное состояние системы является вакуумом и, следовательно, среднее значение нормального произведения в основном состоянии равно нулю. (При наличии взаимодействия дело обстоит сложнее, но именно взаимодействие обычно и включается в H_1' ; оператор же H_0' описывает систему свободных частиц.) Далее, записав произведение операторов в нормальном виде, легко непосредственно усмотреть, какие именно переходы оно описывает. По этой причине для конкретных расчетов удобно было бы представить T -произведения, фигурирующие в ряду для S' -матрицы, в виде суммы нормальных произведений и, может быть, еще каких-то слагаемых неоператорной природы. Это преобразование как раз и составляет содержание теоремы Вика. Пусть для начала мы имеем T -произведение двух операторов $T\{C_1', C_2'\}$. Положим по определению

$$T\{C_1' C_2'\} = :C_1' C_2': + \overline{C_1' C_2'}, \quad (I. 23)$$

где величина $\overline{C_1' C_2'}$ определяется этим соотношением и называется хронологической сверткой (или, короче, просто сверткой) операторов C_1' и C_2' . Поскольку вакуумное среднее нормального произведения равно нулю, мы получаем из (I. 23)

$$\langle \overline{C_1' C_2'} \rangle_0 = \langle T\{C_1' C_2'\} \rangle_0. \quad (I. 24)$$

Допустим теперь, что свертка $\overline{C_1' C_2'}$ есть c -число. (Так обстоит дело в практически наиболее интересных случаях.) Тогда вместо (I. 24) можно написать просто

$$\overline{C_1' C_2'} = \langle T\{C_1' C_2'\} \rangle_0. \quad (I. 25)$$

Иначе говоря, если хронологическая свертка двух операторов есть c -число, то она с точностью до множителя i совпадает с соответствующей причинной функцией Грина. С этим и связано название «причинная функция»: свертки определяют элементы S' -матрицы, описывающей причинную эволюцию квантовомеханической системы во времени. При этом формула (I. 23), очевидно, решает поставленную задачу для частного случая двух операторов: выражение $T\{C_1' C_2'\}$ представлено в виде суммы нормального произведения и члена

неоператорной природы. Чтобы обобщить этот результат на случай произвольного числа операторов, следует ввести еще одно понятие — нормального произведения со свертками. Подчеркнем, что все дальнейшее относится лишь к специальному случаю, когда хронологическая свертка любых двух линейных комбинаций операторов порождения и уничтожения есть c -число.

Пусть мы имеем произведение

$$: C'_1(x_1) \dots \overbrace{C'_j(x_j) \dots C'_k(x_k)} \dots C'_n(x_n) :,$$

в котором два оператора, C'_j и C'_k , подвергаются хронологическому свертыванию. Положим по определению

$$\begin{aligned} &: C'_1(x_1) \dots \overbrace{C'_j(x_j) \dots C'_k(x_k)} \dots C'_n(x_n) : = \\ &= (-1)^{\mathcal{P}} \overbrace{C'_j(x_j) C'_k(x_k)} : C'_1(x_1) \dots C'_{j-1}(x_{j-1}) C'_{j+1}(x_{j+1}) \dots \\ &\quad \dots C'_{k-1}(x_{k-1}) C'_{k+1}(x_{k+1}) \dots C'_n(x_n) :, \quad (I. 26) \end{aligned}$$

где $\mathcal{P}$ есть четность перестановки ферми-операторов при переходе от порядка

$$1, \dots, j-1, j, j+1, \dots, k-1, k, k+1, \dots, n$$

к порядку

$$j, k, 1, \dots, j-1, j+1, \dots, k-1, k+1, \dots, n.$$

Теорема Вика для T -произведений гласит: T -произведение n линейных комбинаций операторов порождения и уничтожения равно сумме их нормальных произведений со всеми возможными свертками (в том числе и вообще без свертки). Доказательство этого утверждения можно найти в любом современном учебнике по квантовой теории поля (см., например, [1]).

Вид сверток, фигурирующих в теореме Вика, легко установить: уже отмечалось, что это — просто функции Грина для соответствующих операторов. Заметим, однако, что фактически здесь следует говорить о невозмущенных функциях Грина. Действительно, легко видеть, что свертка двух бозе-(ферми)-операторов есть c -число тогда и только тогда, когда коммутатор (антикоммутатор) их есть c -число. Так

обстоит дело в представлении взаимодействия, когда операторы подчиняются уравнениям движения для свободного поля, но не в представлении Гейзенберга. Таким образом, мы имеем

$$\overline{a'(x)} \bar{a}'(x') = -iG_c^{(0)}(x, x'), \quad (I. 27)$$

$$\overline{\Phi'(x)} \bar{\Phi}'(x') = iD_c^{(0)}(x, x'), \quad (I. 28)$$

$$\left. \begin{aligned} \overline{a'(x')} \bar{a}'(x) &= \overline{\bar{a}'(x')} a'(x) = 0, \\ \overline{\Phi'(x)} \bar{a}'(x') &= \overline{\bar{\Phi}'(x')} \bar{a}(x) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (I. 29)$$

Равенства (I. 29) легко получаются из закона сохранения числа частиц.

Итак, представление S' -матрицы в нормальном виде действительно оказывается возможным. Для дальнейшего удобно принять специальное соглашение о записи нормальных произведений. Именно из формулы (I. 21) явствует, что в n -м порядке теории возмущений член без сверток содержит нормальное произведение n пар ферми-операторов

$$: \bar{a}'(x_1) a'(x_1) \dots \bar{a}'(x_n) a'(x_n) : .$$

В силу (I. 27) во всех прочих слагаемых также будет содержаться по равному числу фермиевских операторов порождения и уничтожения. Разобьем их на пары так, чтобы члены каждой пары соответствовали аргументам сверток. Например, если свертываются операторы $\bar{a}'(x_i)$ и $a'(x_j)$, то пару образуют $a'(x_i)$ и $\bar{a}'(x_j)$. Условимся писать члены пары рядом, причем в каждой паре $\bar{a}'$ слева от a' (порядок следования пар в нормальном произведении, очевидно, безразличен). Это соглашение позволит нам в дальнейшем сформулировать правило определения знака перед произвольным членом T -произведения.

в) Диаграммы Фейнмана

Фактическое приведение членов разложения S' -матрицы к нормальному виду удобно производить графическим способом. Из формул (I. 21) и (I. 27) — (I. 29) видно, что все члены разложения строятся из трех основных «элементов»: сверток $iG_c^{(0)}(x, x')$, $iD_c^{(0)}(x, x')$ и произведения операторов

$g\bar{a}'(x)\Gamma^{(0)}a'(x)\Phi'(x)$. Соответственно введем графические символы, представленные в нижеследующей таблице:

Множитель	Изображение	Наименование
$\overline{\Phi'(x)}\Phi'(x')$		Внутренняя бозонная линия
$\overline{a'(x)}a'(x')$		Внутренняя фермионная линия
$\Phi'(x)$ (под знаком нормального произведения)		Внешняя бозонная линия
$a'(x)$ (под знаком нормального произведения)		Внешняя входящая фермионная линия
$\bar{a}'(x)$ (под знаком нормального произведения)		Внешняя выходящая фермионная линия
$g\Gamma^{(0)}$ (из лагранжиана $L'_1(x)$)		Вершина (узел)

Название «внутренние» и «внешние» линии связано с тем, что первые начинаются и кончаются в пределах диаграммы, вторые же уходят в бесконечность. Из структуры разложения S' -матрицы непосредственно видно, что внешние линии описывают частицы, реально поглощаемые и испускаемые в ходе данного процесса; с другой стороны, внутренние линии соответствуют виртуальным переходам.

Таблица дает правила соответствия между множителями в членах разложения S' -матрицы и символами на диаграмме.

Рассмотрим, в частности, некоторые диаграммы первого и второго порядка, соответствующие членам, явно выписанным в (I.22). Типичная диаграмма, соответствующая членам

первого порядка, приведена на рис. 1. Наличие двух фермионных и одной бозонной внешних линий соответствует, как мы знаем, испусканию или поглощению бозона с изменением состояния одного из фермионов.

Среди диаграмм, соответствующих членам второго порядка, отметим представленные на рис. 2 и 3. Первая из них описывает влияние виртуальных электронных переходов на распространение¹⁾ бозона, т. е. эффект «поляризации вакуума», вторая — влияние испускания и поглощения виртуальных бозонов на движение фермиона («собственная

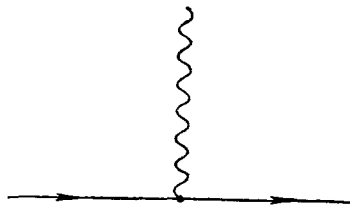


Рис. 1.

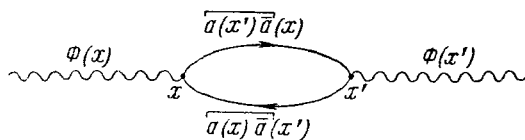


Рис. 2.

энергия фермиона»). Обратим внимание еще на одну из диаграмм третьего порядка (рис. 4). Если вычеркнуть в ней внутренние линии, это была бы просто диаграмма, приведенная на рис. 1. Внутренние линии описывают влияние виртуальных

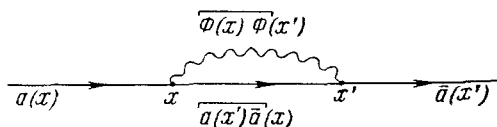


Рис. 3.

процессов на элементарный акт испускания или поглощения бозона: взаимодействие из точечного превращается в нелокальное (с областью «размазки», определяемой расстоянием, на котором обращаются в нуль фермионная и бозонная свертки).

¹⁾ По этой причине функции Грина иногда называют функциями распространения.

Способ приведения S' -матрицы к нормальному виду теперь становится совершенно очевидным: интересуясь членами n -го порядка, надо начертить n точек, в каждой из которых встречаются три линии — две фермионные (входящая и выходящая) и одна бозонная. Фермионные линии при этом будут либо образовывать замкнутые циклы, либо уходить к краям диаграммы («свободные концы»). Далее надлежит воспользоваться правилами соответствия, приняв во внимание

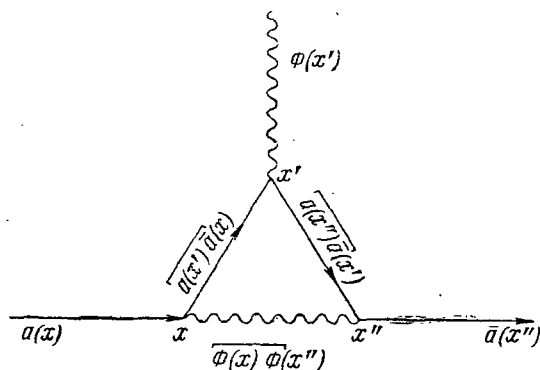


Рис. 4.

еще правило знаков. Легко убедиться, что при наличии замкнутых фермионных циклов все выражение надо помножить на $(-1)^l$, где l — число циклов.

Изложенная процедура есть не что иное, как стандартная квантовомеханическая теория возмущений, приведенная лишь к виду, максимально удобному для практического использования. В связи с этим возникает вопрос о суммировании ряда или хотя бы о нахождении частичных его сумм. (Об этом обычно говорят, как о суммировании диаграмм.) Очевидно, при рассмотрении того или иного конкретного эффекта надо суммировать лишь диаграммы с одним и тем же числом и типом внешних линий — различные порядки теории возмущений отличаются друг от друга лишь различной степенью учета виртуальных процессов. Иначе говоря, прежде всего надо начертить простейшую диаграмму, описывающую исследуемый процесс в наинизшем возможном порядке теории возмущений (такая диаграмма называется скелетной). Далее

надо всеми возможными способами вставить в нее внутренние линии (соответственно увеличивая число вершин). Сумма всех таких диаграмм (если она сходится) дает точное значение элемента S' -матрицы для исследуемого процесса. Отметим, в частности, один специальный класс диаграмм — диаграммы, вообще не содержащие внешних линий (см., например, рис. 5) или содержащие изолированные части без внешних линий («несвязные» диаграммы, рис. 6). Они описывают «процессы», не сопровождающиеся какими-либо реальными изменениями в системе (переходы «ва-

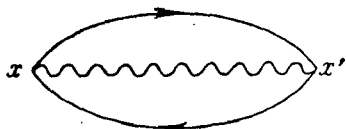


Рис. 5.

$x'' \longleftrightarrow x'''$

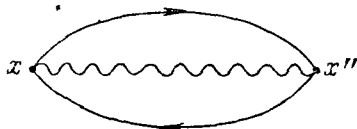


Рис. 6.

куум — вакуум»). В квантовой теории поля матричные элементы такого типа не имеют смысла и должны быть исключены (мы увидим сейчас, что фактически в выражениях типа (1.15) они исключаются автоматически); с другой стороны, в нерелятивистской задаче многих тел именно эти величины определяют энергию основного состояния. Из правил соответствия явствует, что переходы рассматриваемого типа отвечают «полностью свернутым» (вообще не содержащим операторов) членам разложения S' -матрицы. Следовательно, сумма их равна вакуумному среднему $\langle S' \rangle_0$. Исходя из выражения (1.16a), легко получить формулу

$$\langle S'(x_0, x'_0) \rangle_0 = e^{-i\Delta E(x_0 - x'_0)}, \quad (1.30)$$

где ΔE — сдвиг энергии основного состояния за счет взаимодействия. Знаменатель $\langle S' \rangle_0$ в (1.15) как раз и гарантирует исключение вкладов от несвязных диаграмм. (В задаче многих тел именно благодаря этому обстоятельству спектральное разложение функций Грина содержит только разности энергий различных состояний системы, но не сами эти энергии.)

Другой важный класс составляют диаграммы с двумя внешними линиями. Легко видеть, что сумма всех диаграмм с двумя заданными внешними линиями есть не что иное, как

соответствующая полная одночастичная функция Грина ¹⁾. Так, например, сумма всех диаграмм с одной входящей и одной выходящей фермионными линиями есть однофермионная функция Грина (5.2) при $T=0$. Справедливость сказанного видна непосредственно из определения полных функций Грина как вакуумных средних от гейзенберговских операторов. Действительно, взаимодействие как раз и превращает операторы $\bar{a}', a', \Phi'$ в $\bar{a}, a, \Phi$.

Аналогично двухчастичные, трехчастичные и т. д. функции Грина также представляют собой частичные суммы ряда теории возмущений, изображаемые диаграммами с соответствующим числом внешних линий того или иного типа. Это обстоятельство позволяет выполнять суммирование диаграмм «по этапам». Именно, введем, обобщая случаи, представленные на рис. 2—4, понятия части собственной энергии, поляризации вакуума и вершинной части. По определению, частью собственной энергии называется диаграмма (или часть диаграммы), соединенная с остальными ее частями (или краем чертежа) лишь двумя внешними фермионными линиями. Очевидно, она получается из диаграммы рис. 3, если вставить в последнюю все возможные внутренние линии. Аналогично частью поляризации вакуума именуется диаграмма, имеющая лишь две внешние бозонные линии, а вершинной частью — диаграмма с двумя фермионными и одной бозонной внешними линиями. Таким образом, разность $G_c - G_c^{(0)}$ определяется суммой всех частей собственной энергии, $D_c - D_c^{(0)}$ — суммой всех частей поляризации вакуума, а $\Gamma - \Gamma^0$ — суммой всех вершинных частей диаграмм. Введем далее понятие неприводимой диаграммы как диаграммы, не содержащей вершинных частей, частей собственной энергии и частей поляризации вакуума. (Неприводимая диаграмма, вообще говоря, не совпадает со скелетной, ибо может содержать дополнительные внутренние линии.) Неприводимые диаграммы, получающиеся из данной скелетной добавлением различных внутренних линий, мы будем называть принадлежащими ей. Из определения вытекает, что для вычисления элемента S' -матрицы, соответствующего какому-либо процессу, надо

а) начертить скелетную диаграмму;

¹⁾ Напомним, что здесь функции Грина определяются как средние по вакууму — основному состоянию системы.

б) составить сумму всех принадлежащих ей неприводимых диаграмм;

в) заменить в ней невозмущенные функции Грина $G_c^{(0)}$, $D_c^{(0)}$ и вершинную часть $\Gamma^{(0)}$ на точные G_c , D_c , Γ . Во внешних линиях при этом следует поставить «перенормированные» — вычисленные с полным учетом взаимодействия — энергии фермионов и бозонов. Эту процедуру мы будем называть правилом Дайсона, ибо она впервые была предложена Дайсоном [5] в рамках квантовой электродинамики.

В задачах квантовой теории поля «перенормированные» энергии — при надлежащем доопределении T -произведений при совпадающих аргументах — совпадают с «исходными» («затравочными») [1], почему иногда и говорят, что во внешних линиях ничего менять не надо. В задаче многих тел, однако, отличие «перенормированных» энергий от «затравочных» описывает реальные физические явления (например, возникновение плазменных колебаний), и указанная здесь замена обязательна. В этом проще всего убедиться, вычисляя элементы S' -матрицы с помощью преобразования Фурье по времени и принимая во внимание связь спектра возбуждений с полюсами функций Грина (§§ 4, 5, 16). При наличии нескольких типов возбуждений появится — соответственно числу различных полюсов у функций Грина — столько же типов внешних линий.

Заметим, что приведенное выше определение неприводимых диаграмм не является «абсолютным», а зависит от того, по отношению к каким функциям Грина оно дается. Именно, в общем случае диаграмма называется неприводимой, если она не содержит элементов, сумма которых дает функции Грина, явно принимаемые в данном случае во внимание (разумеется, кроме скелетных элементов). Так, введя в рассмотрение, помимо уже указанных, еще и двухфермионные функции Грина, мы должны были бы считать неприводимыми диаграммы, не содержащие также и «четырехполюсников» — частей, соединенных с остатком диаграммы только двумя парами фермионных линий. Соответственно следовало бы переформулировать и правило Дайсона, дополнив его требованием замены $G_{2c}^{(0)}$ на G_{2c} .

Разумеется, само по себе ни правило Дайсона, на какое-либо другое правило, ему аналогичное, еще не решает

задачу о вычислении S' -матрицы, а лишь делит ее на несколько стадий (в чисто вычислительном отношении это может оказаться очень полезным). Во всех случаях, однако, приходится вычислять те или иные частичные суммы ряда теории возмущений, что сводится, как правило, к решению некоторых интегральных уравнений. Упрощения, которые приходится при этом делать, основаны на сравнительной оценке вкладов от диаграмм разного вида. При достаточно малой константе связи иногда действительно удается выделить класс диаграмм, дающих главный вклад в те или иные элементы матрицы рассеяния. Отбрасывая все остальные поправки, приходим к так называемой процедуре суммирования главных диаграмм, эквивалентной (при $T=0$) улучшенной теории возмущений, изложенной в § 11.

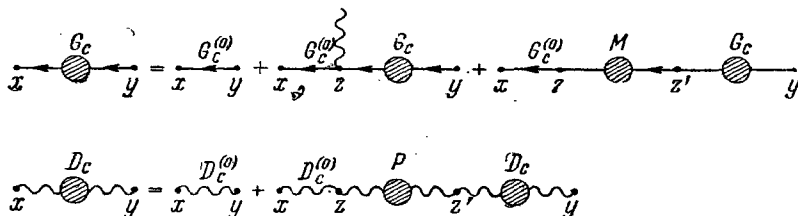


Рис. 7.

Сами уравнения Дайсона для функций Грина (при $T=0$) также можно представить графически. Для этой цели условимся снабжать заштрихованными кружками внутренние линии, содержащие уже все возможные «вставки». Тогда, принимая во внимание правила соответствия, можем изобразить уравнения (10.1) и (10.2) в виде рис. 7. При этом массовый и поляризационный операторы, (10.4) и (10.5), изображаются схемами рис. 8.

В заключение этого пункта сделаем еще два замечания.

Во-первых, все рассуждения о суммировании диаграмм носили чисто формальный характер, ибо основывались на определенных предположениях об аналитических свойствах искомых функций. В частности, неявно предполагалась сходимость ряда теории возмущений в точке $g=0$. Фактически, однако, это предположение может оказаться и несправедливым. Так, например, в квантовой электродинамике ряд теории возмущений, по-видимому, является асимптотическим [1].

Соответственно, процедура суммирования «главных диаграмм» может потерять однозначность (см. [6], [7]).

Во-вторых, метод диаграмм в изложенной здесь форме связан с усреднением по основному состоянию системы

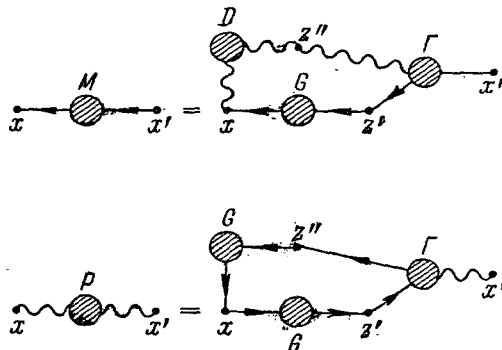


Рис. 8.

($T=0$). Обобщение его на случай температурных функций Грина требует известных модификаций, на которых мы здесь не будем останавливаться.

г) Правила перестановки при совпадающих временах

Лагранжиан свободного электромагнитного поля имеет вид (см. [1])

$$L_0(x) = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} g^{\alpha\alpha} : \left\{ \frac{1}{c_0^2} \left(\frac{\partial A_{\alpha}(x)}{\partial x_0} \right)^2 - \sum_{l=1, 2, 3} \left(\frac{\partial A_{\alpha}(x)}{\partial x_l} \right)^2 \right\} : \quad (I. 31)$$

Роль обобщенных координат играют здесь компоненты 4-потенциала $A_{\alpha}(x)$. Следовательно, обобщенные импульсы суть

$$\mathcal{P}^{\alpha}(x) = \frac{\partial L_0}{\partial \frac{\partial A_{\alpha}}{\partial x_0}} = -\frac{1}{c_0^2} g^{\alpha\beta} \frac{\partial A_{\beta}(x)}{\partial x_0}. \quad (I. 32)$$

Соответственно канонические правила перестановки имеют вид

$$[A_{\alpha}(x, x_0), A_{\beta}(x', x_0)]_- = 0, \quad (I. 33)$$

$$\left[\frac{\partial A_{\alpha}(x, x_0)}{\partial x_0}, A_{\beta}(x', x_0) \right]_- = i c_0^2 g_{\alpha\beta} \delta(x - x'). \quad (I. 34)$$

Дифференцируя (I. 33) по x_i , получим

$$\left[\frac{\partial A_\alpha(x, x_0)}{\partial x_i}, A_\beta(x', x_0) \right]_- = 0. \quad (\text{I. 35})$$

д) Однородная диэлектрическая и магнитная среда

Рассмотрим электромагнитное поле в отсутствие свободных зарядов в пространственно однородной среде, характеризующейся вещественными скалярными диэлектрической и магнитной проницаемостями ϵ и μ .

Как известно, систему классических уравнений Максвелла при этом можно записать в виде ¹⁾

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla A_0, \quad (\text{I. 36})$$

$$\frac{\epsilon \mu}{c_0^2} \frac{\partial^2 A_\alpha}{\partial t^2} - \nabla^2 A_\alpha = 0, \quad (\text{I. 37})$$

$$\frac{\epsilon \mu}{c_0} \frac{\partial A_0}{\partial t} - \text{div } \mathbf{A} = 0, \quad (\text{I. 38})$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{B} &= \mu \mathbf{H}, \\ \mathbf{D} &= \epsilon \mathbf{E}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{I. 39})$$

Пара уравнений

$$\text{div } \mathbf{B} = 0, \quad \text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

при этом представляет собой следствие определений (I.36), другая же пара

$$\text{div } \mathbf{D} = 0, \quad \text{rot } \mathbf{H} = \frac{1}{c_0} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

эквивалентна (I.36)—(I.37) с учетом материальной системы (I.39) и дополнительного условия Лоренца (I.38).

¹⁾ Мы пользуемся только системой отсчета, связанной со средой. Формулировку, ковариантную относительно преобразований Лоренца, можно найти, например, в работах [8], [9].

Легко убедиться, что уравнения (I. 37) непосредственно получаются из лагранжиана

$$L(x) = -\frac{1}{2} \sum_a g^{aa} \left\{ \frac{1}{c_0^2} \left(\frac{\partial A_a}{\partial x_0} \right)^2 - \sum_{i=1, 2, 3} \left(\frac{\partial A_a}{\partial x_i} \right)^2 \right\} + \\ + \frac{n^2 - 1}{2} \sum_{i=1, 2, 3} \left(\frac{\partial A_0}{\partial x_i} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial A_i}{\partial x_0} \right)^2 - \frac{(n^2 - 1)^2}{2c_0^2} \left(\frac{\partial A_0}{\partial x_0} \right)^2 - \\ - (n^2 - 1) \frac{1}{c_0} \frac{\partial A_0}{\partial x_0} \left\{ \frac{1}{c_0} \frac{\partial A_0}{\partial x_0} - \sum_{i=1, 2, 3} \frac{\partial A_i}{\partial x_i} \right\}. \quad (\text{I. 40})$$

Здесь $n^2 = \epsilon\mu$. Выражение (I. 40) есть непосредственное обобщение (I. 31) на случай рассматриваемой диэлектрической и магнитной среды. При переходе к квантованию все произведения в (I. 40) следует понимать как нормальные, а равенство (I. 38) заменить аналогичным условием, наложенным на допустимые волновые функции системы или (что сводится к тому же) на средние значения операторов A_α . В полной аналогии с (I. 32) для обобщенных импульсов находим

$$\mathcal{P}^0(x) = -\frac{n^4}{c_0^2} \frac{\partial A_0}{\partial x_0} + \frac{n^2 - 1}{c_0} \frac{\partial A_i}{\partial x_i}, \quad (\text{I. 41})$$

$$\mathcal{P}^i(x) = \frac{n^2}{c_0^2} \frac{\partial A_i}{\partial x_0} - \frac{n^2 - 1}{c_0} \frac{\partial A_0}{\partial x_i}. \quad (\text{I. 42})$$

При этом правила перестановки (I. 33) и (I. 35) остаются в силе, а вместо (I. 34) мы получаем

$$\left[\frac{\partial A_\alpha(x, x_0)}{\partial x_0}, A_\beta(x', x_0) \right] = i \frac{c_0^2}{n^2} g_{\alpha\beta} \left(\delta_{\alpha i} + \frac{\delta_{\alpha 0}}{n^2} \right) \delta(x - x'). \quad (\text{I. 43})$$

Здесь суммирование по α не производится. Нетрудно найти и соответствующие четырехмерные правила перестановки [9], но нам они не понадобятся.

Рассматривая выражения (I. 36) — (I. 43), нетрудно убедиться, что можно полностью исключить величины ϵ и μ из уравнений поля, если

а) всюду заменить скорость света в вакууме c_0 на скорость света в среде $c = c_0 / \sqrt{\epsilon\mu}$,

б) заменить фактические компоненты потенциала (и поля) «перенормированными» величинами

$$\begin{aligned} A_{i,r} &= A_i, & A_{0,r} &= \sqrt{\varepsilon\mu} A_0, \\ B_r &= B, & E_r &= \sqrt{\varepsilon\mu} E. \end{aligned} \quad (I. 44)$$

в) заменить истинную энергию поля W «перенормированной» величиной

$$W_r = \mu W. \quad (I. 45)$$

Например, для плотности энергии электромагнитного поля в вакууме имеем $\frac{E^2 + B^2}{2}$; рассматривая эту величину как W_r , для плотности энергии в диэлектрике получаем согласно (I. 44) и (I. 45)

$$\frac{\varepsilon\mu E^2 + B^2}{2\mu} = \frac{\varepsilon E^2 + \mu H^2}{2},$$

как и должно быть. При этом для перенормированных полей B и E получаются обычные уравнения Максвелла в пустоте (с заменой c_0 на c).

При наличии токов и свободных зарядов величины ε и μ также можно формально исключить из уравнений Максвелла, если ввести, помимо перенормированного потенциала, также и перенормированные заряд и ток

$$e_r = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} e, \quad J_r = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} J. \quad (I. 46)$$

Чтобы убедиться в этом, достаточно написать уравнения (I. 37) с соответствующими правыми частями.

При наличии дисперсии диэлектрической и магнитной проницаемостей правила (I. 44) — (I. 46) остаются в силе для соответствующих компонент Фурье.

В основном тексте книги (кроме гл. VII) мы пользуемся перенормированными величинами, опуская при этом значок r .

е) Взаимодействие через поле и прямое взаимодействие

Формулы (I. 18) и (I. 22) в сочетании с правилом Дайсона позволяют, в частности, рассмотреть вопрос о связи взаимодействия через поле с прямым бинарным взаимодействием между частицами и выяснить, когда эти два представления эквивалентны.

Рассмотрим систему ферми-частиц, взаимодействующих с квантовым полем согласно (I. 22). Как мы видели в п. 6), во втором приближении матрица рассеяния содержит элементы, описывающие изменение фермионных состояний при неизменном состоянии бозевского поля. Физически эти элементы соответствуют, например, процессам рассеяния фермионов друг на друге; бозевское поле при этом играет лишь роль передатчика взаимодействия. Такие процессы могут происходить и в отсутствие бозевских квантов (в «бозонном вакууме»). Соответствующие элементы S' -матрицы мы получим, вычисляя среднее значение (I. 22) в состоянии без бозонов («усреднение по бозонному вакууму»). Будем обозначать эту операцию символом $\langle \dots \rangle_{B, 0}$ и снабдим S' индексом 2, указывающим, что речь идет лишь о членах второго порядка. Согласно (I. 22) мы имеем

$$\langle S'_2(\infty) \rangle_{B, 0} = -\frac{g^2}{2} \int dx dx' \times \\ \times T \{ \bar{a}'(x) \Gamma^{(0)} a'(x) \bar{a}'(x') \Gamma^{(0)} a'(x') \} i D_c^{(0, 0)}(x, x'), \quad (\text{I. 47})$$

где

$$D_c^{(0, 0)}(x, x') = -i \langle \Phi'(x) \Phi'(x') \rangle_{B, 0}.$$

Индекс (0, 0) [а не просто «0», как в (7.11)] поставлен в связи с тем, что усреднение здесь производится по бозонному вакууму в системе двух частиц (а не по состоянию системы многих частиц).

Процессы взаимодействия между фермионами описываются матричными элементами (I. 47), связывающими состояния системы с двумя частицами в каждом (мы будем обозначать их через $\langle S'_2(\infty) \rangle_{B, 0, F, 2}$). Будем считать, что в начале и конце акта взаимодействия частицы находятся в стационарных состояниях, характеризуемых какими-то квантовыми числами λ . Соответственно запишем фигурирующие в (I. 47) операторы $\bar{a}'$, a' в λ -представлении

$$a'(x) = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(x) e^{-i W(\lambda) x_0} a'(\lambda), \\ \bar{a}'(x) = \sum_{\lambda} \bar{\psi}_{\lambda}(x) e^{i W(\lambda) x_0} \bar{a}'(\lambda). \quad (\text{I. 48})$$

Здесь $\psi_{\lambda}(x)$ суть, как всегда, собственные функции опера-

тора, соответствующего динамической переменной λ (они же, по условию, собственные функции «одночастичного» гамильтониана), $W(\lambda)$ — принадлежащие им собственные значения энергии, $\bar{a}'(\lambda)$ и $a'(\lambda)$ — операторы порождения и уничтожения частицы в состоянии λ . Пусть в начальном и конечном состояниях значения λ для наших двух частиц суть λ_1, λ_2 и λ_3, λ_4 . Матричные элементы T -произведения в (I. 47) теперь легко вычислить. Мы получим при этом две пары слагаемых, причем слагаемые, входящие в данную пару, при интегрировании дают одинаковые результаты (с учетом симметрии функции $D_c^{(0,0)}$). Таким образом, $\langle S'_2(\infty) \rangle_{B0, F2}$ представляется в виде суммы двух членов

$$\langle S'_2(\infty) \rangle_{B0, F2} = S'_{12, 34} - S'_{12, 43}. \quad (\text{I. 49})$$

Здесь

$$S'_{12, 34} = -ig^2 \int dx dx' D_c^{(0,0)}(x, x') \bar{\psi}_4(x') \Gamma^{(0)} \psi_2(x') \times \\ \times \bar{\psi}_3(x) \Gamma^{(0)} \psi_1(x) e^{i[W(\lambda_4) - W(\lambda_2)]x'_0 + i[W(\lambda_3) - W(\lambda_1)]x_0}, \quad (\text{I. 50})$$

а $S'_{12, 43}$ получается из (I. 50) заменой индексов $3 \rightleftharpoons 4$ (этот член называется обменным по отношению к первому). Знак минус в (I. 49) связан с тем, что мы имеем дело с ферми-частицами; для системы бозе-частиц мы получили бы ту же формулу (I. 49), но со знаком плюс. Разложим функцию $D_c^{(0,0)}(x, x')$ в интеграл Фурье по времени

$$D_c^{(0,0)}(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(x_0 - x'_0)} D_c^{(0,0)}(x, x'; \omega) \quad (\text{I. 51})$$

и введем сокращенные обозначения

$$W(\lambda_4) - W(\lambda_2) = \omega_{42} \quad \text{и т. д.} \quad (\text{I. 52})$$

Тогда формула (I. 50) примет вид

$$S'_{12, 34} = -ig^2 (2\pi)^2 \delta(\omega_{42} + \omega_{31}) \int dx dx' \bar{\psi}_4(x') \Gamma^{(0)} \psi_2(x') \times \\ \times D_c^{(0,0)}\left(x, x'; \frac{\omega_{42} - \omega_{31}}{2}\right) \bar{\psi}_3(x) \Gamma^{(0)} \psi_1(x). \quad (\text{I. 53})$$

В силу (I.52)

$$\omega_{42} + \omega_{31} = \omega_{32} + \omega_{41} = W(\lambda_4) + W(\lambda_3) - W(\lambda_2) - W(\lambda_1).$$

Таким образом, дельта-функция в (I.53), как и следовало ожидать, выражает просто закон сохранения энергии при рассеянии. На основании (I.18) находим теперь матрицу эффективной энергии возмущения

$$U = U_{12,34} - U_{12,43}. \quad (\text{I.54})$$

$$U_{12,34} = 2\pi g^2 \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \bar{\psi}_4(\mathbf{x}') \Gamma^{(0)} \psi_2(\mathbf{x}') \times \\ \times D_c^{(0,0)}\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \frac{\omega_{42} - \omega_{31}}{2}\right) \bar{\psi}_3(\mathbf{x}) \Gamma^{(0)} \psi_1(\mathbf{x}). \quad (\text{I.55})$$

Величина $U_{12,43}$ получается отсюда перестановкой индексов $3 \rightleftharpoons 4$.

Формула (I.55) похожа на обычное квантовомеханическое выражение для средней энергии парного взаимодействия (если под энергией взаимодействия понимать величину $2\pi g^2 D_c^{(0,0)}$). Следует, однако, обратить внимание на одно весьма существенное обстоятельство: функция $D_c^{(0,0)}\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \frac{\omega_{42} - \omega_{31}}{2}\right)$ зависит от того, между какими состояниями происходит переход. По этой причине сходство (I.55) со средней энергией взаимодействия — чисто внешнее, и в общем случае представление о потенциальной энергии прямого взаимодействия между частицами ввести нельзя. Исключение составляет случай, когда функция $D_c^{(0,0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ фактически не зависит от ω (или, что сводится к тому же, «частотами переходов» ω_{42} и ω_{31} можно пренебречь по сравнению с какой-то константой, фигурирующей в $D_c^{(0,0)}$). Тогда правая часть (I.55) есть действительно средняя энергия парного взаимодействия, описываемого оператором

$$U_0 = 2\pi g^2 \Gamma^{(0)} D_c^{(0,0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Gamma^{(0)} \quad (\text{I.56})$$

(индекс 0 при U поставлен в связи с тем, что формула (I.56) есть результат лишь первого исчезающего приближения). Из формулы (I.51) явствует, что при этом функция $D_c^{(0,0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ дельтаобразно зависит от своих временных аргументов:

$D_c^{(0,0)}(x, x') \sim \delta(x_0 - x'_0)$. Иначе говоря, в рассматриваемом случае взаимодействие носит мгновенный характер — запаздывание отсутствует.

Итак, в пренебрежении запаздыванием и во втором приближении по константе связи g оказывается возможным ввести оператор потенциальной энергии прямого взаимодействия между частицами (I. 56). Это утверждение в равной мере справедливо как для фермионов, так и для бозонов. В последнем случае надо лишь переменить знак в формуле (I. 54) (плюс вместо минуса). Согласно (I. 20) вероятности всех процессов, при которых не изменяется состояние поля, определяются матричными элементами этого оператора. Это означает, что интересуясь только такими процессами, мы можем вообще «забыть» о существовании квантового поля и заменить точный гамильтониан (I. 21) гамильтонианом бинарного взаимодействия типа (6.8а). Заметим в связи с этим, что оператор U_0 (I. 56) имеет привычный вид функции от $x - x'$ (x и x' — координаты взаимодействующих частиц), умноженной, может быть, на некоторые матрицы $\Gamma^{(0)}$. В этом ограниченном смысле можно говорить об эквивалентности описания системы с помощью «тройного» и «четверного» гамильтонианов (I. 21) и (6.8а).

Переход от второго («первого исчезающего») приближения к точной формуле для S' -матрицы, учитывающей эффекты всех приближений, производится по правилу Дайсона. При этом могут возникнуть дополнительные осложнения, еще более ограничивающие применимость стандартного представления о потенциальной энергии взаимодействия. Чтобы выяснить их природу, достаточно рассмотреть приближение, в котором производится только замена функций $D_c^{(00)}$ и $\Gamma^{(0)}$ на соответствующие точные выражения. В этом случае интересующие нас элементы S' -матрицы примут вид (ср. (I. 53))

$$S'_{12,34} = -ig^2 \int D_c(z, z') \phi_4(y) \Gamma(y, y'; z') \phi_2(y') \times \\ \times \bar{\phi}_3(x) \Gamma(x, x'; z) \phi_1(x') e^{iW(\lambda_4)y_0 - iW(\lambda_2)y'_0} \times \\ \times e^{iW(\lambda_3)x_0 - iW(\lambda_1)x'_0} dz dz' dy dy' dx dx'. \quad (I. 57)$$

Полагая

$$D_c(z, z') = \int d\omega e^{-i\omega(z_0 - z'_0)} D_c(z, z'; \omega), \quad (I. 58)$$

$$\Gamma(x, x'; z) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\omega' d\omega'' e^{-i\omega'(x_0 - z_0) - i\omega''(x'_0 - z_0)} \Gamma(x, x', z; \omega', \omega''),$$

получаем отсюда

$$\begin{aligned} S_{12, 34} = & -ig^2 \int dz dz' dx dx' dy dy' (2\pi)^2 \delta(\omega_{42} + \omega_{31}) \times \\ & \times \bar{\psi}_4(y) \Gamma(y, y', z'; W_4, W_2) \psi_2(y') D_c(z, z'; \frac{\omega_{42} - \omega_{31}}{2}) \times \\ & \times \bar{\psi}_3(x) \Gamma(x, x', z; W_3, W_1) \psi_1(x') \quad (I. 59) \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} U_{12, 34} = & \\ = & 2\pi g^2 \int dz dz' dx dx' dy dy' \bar{\psi}_4(y) \Gamma(y, y', z'; W_4, W_2) \times \\ & \times \psi_2(y') D_c(z, z'; \frac{\omega_{42} - \omega_{31}}{2}) \bar{\psi}_3(x) \Gamma(x, x', z; W_3, W_1) \psi_1(x'). \quad (I. 60) \end{aligned}$$

Как и в простейшем случае (I. 55), правая часть (I. 60) напоминает выражение для матричного элемента некоторого оператора; однако и здесь такой «оператор энергии взаимодействия» фактически можно ввести лишь в пренебрежении запаздыванием. Более того, здесь это пренебрежение связано с еще большими ограничениями, ибо надо иметь возможность пренебречь частотной зависимостью фурье-образов как полной функции Грина D_c , так и вершинной части Γ . Как правило, это можно сделать лишь приближенно — даже если фурье-образ «невозмущенной» функции $D_c^{(0, 0)}$ от частоты не зависел.

Если, наконец, указанные аппроксимации все же возможны, то и тогда мы не получаем простой и привычной «классической» ситуации (I. 56). Действительно, согласно (I. 60) оператор энергии прямого взаимодействия между частицами (если его можно ввести) имеет вид

$$\begin{aligned} U(y, x; y', x') = & 2\pi g^2 \int dz dz' \Gamma(y, y', z') \times \\ & \times D_c(z, z') \Gamma(x, x', z). \quad (I. 61) \end{aligned}$$

Он зависит не от одной пары точек, а от двух (т. е. от трех векторов, например, от $x-x'$, $x-u$, $u-u'$). Соответствующий бинарный гамильтониан прямого взаимодействия имеет общий вид (6.8) без каких-либо упрощений, приводящих к (6.8а).

Итак, замена взаимодействия через поле прямым бинарным взаимодействием возможна лишь при определенных ограничительных условиях и для определенного класса задач. С другой стороны, обратная замена — описание прямого взаимодействия с помощью представления о взаимодействии через поле, очевидно, возможна всегда, коль скоро функция U конечна¹⁾: следует лишь определить фурье-образ $D_c(x, x'; \omega)$ равенством (I.61); вершинные части при этом можно по определению считать дельта-образными. Таким образом, в координатном представлении мы имеем в этом случае

$$g^2 D_c(x, x') = \delta(x_0 - x'_0) U(x - x'). \quad (\text{I. 62})$$

Во избежание недоразумений заметим, что под точной функцией Грина D_c здесь подразумевается выражение, точное относительно взаимодействия двух частиц с виртуальными квантами поля. Эффекты, связанные с коллективным взаимодействием частиц (экранирование), здесь не учитываются по самому смыслу дела — они возникают лишь в системе многих частиц. Таким образом, с точки зрения системы многих тел функция (I.62) есть $D_c^{(0)}$. Именно по этой причине «невозмущенную» функцию Грина мы обозначили выше через $D_c^{(0,0)}$.

¹⁾ Тем самым исключаются сингулярные потенциалы типа, например, твердых шаров.

II. ОПЕРАТОРЫ ПАУЛИ¹⁾

Операторами Паули называются операторы $b(\lambda)$, $\bar{b}(\lambda)$, удовлетворяющие следующим перестановочным соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} b(\lambda') \bar{b}(\lambda) - \bar{b}(\lambda) b(\lambda') &= 0, \\ b(\lambda) b(\lambda') - b(\lambda') b(\lambda) &= 0, \end{aligned} \right\} \lambda' \neq \lambda, \quad (\text{II. 1})$$

$$\left. \begin{aligned} b(\lambda) \bar{b}(\lambda) + \bar{b}(\lambda) b(\lambda) &= 1, \\ b(\lambda) b(\lambda) + b(\lambda) b(\lambda) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (\text{II. 2})$$

Нетрудно заметить, что равенства (II. 1) и (II. 2) представляют собой комбинацию перестановочных соотношений для операторов Бозе (при $\lambda' \neq \lambda$) и Ферми (при $\lambda' = \lambda$).

Операторы Паули тесно связаны с операторами спина. Действительно, положим $\lambda = f$ — номеру узла решетки, и введем величины

$$\left. \begin{aligned} S_1(f) &= -(b(f) + \bar{b}(f)), \\ S_2(f) &= i(b(f) - \bar{b}(f)), \quad S_3(f) = 1 - 2n(f), \end{aligned} \right\} \quad (\text{II. 3})$$

где $n(f) = \bar{b}(f)b(f)$, или

$$\left. \begin{aligned} S_1(f) &= b(f) + \bar{b}(f), \\ S_2(f) &= i(\bar{b}(f) - b(f)), \quad S_3(f) = 1 - 2n(f). \end{aligned} \right\} \quad (\text{II. 4})$$

Пользуясь (II. 1) и (II. 2), легко убедиться, что величины S_i удовлетворяют перестановочным соотношениям для компонент вектора спина электрона (записанного в единицах $\hbar/2$). Общее представление операторов $S_i(f)$ через $b(f)$, $\bar{b}(f)$ имеет вид

$$S_i(f) = \sigma_i(f)[1 - 2n(f)] + A_i(f)b(f) + \bar{A}_i(f)\bar{b}(f), \quad (\text{II. 5})$$

¹⁾ См. [10], [11].

где $\sigma_i(f)$ — компоненты классического единичного вектора;

$$\begin{aligned} A_1(f) &= -e^{i\varphi_f} \frac{1 + \sigma_3(f)}{2} + e^{-i\varphi_f} \frac{1 - \sigma_3(f)}{2}, \\ A_2(f) &= i \left[e^{i\varphi_f} \frac{1 + \sigma_3(f)}{2} + e^{-i\varphi_f} \frac{1 - \sigma_3(f)}{2} \right], \\ A_3(f) &= \sqrt{1 - \sigma_3^2(f)}, \quad \varphi_f = \operatorname{arctg} \frac{\sigma_2(f)}{\sigma_1(f)}. \end{aligned} \quad (\text{II. 6})$$

Сравнивая (II. 3) и (II. 5), получаем формулы канонического преобразования для операторов Паули. Для практических целей достаточно рассмотреть частный случай $\sigma_2(f) = 0$. Тогда имеем ($\beta, \bar{\beta}$ — новые операторы Паули)

$$\begin{aligned} \beta(f) &= -u(f)v(f)[1 - 2n(f)] + \\ &\quad + u^2(f)b(f) - v^2(f)\bar{b}(f), \\ \bar{\beta}(f) &= -u(f)v(f)[1 - 2n(f)] + \\ &\quad + u^2(f)\bar{b}(f) - v^2(f)b(f), \\ \bar{\beta}(f)\beta(f) &= v^2(f) + [u^2(f) - v^2(f)]n(f) - \\ &\quad - u(f)v(f)(b(f) + \bar{b}(f)). \end{aligned} \quad (\text{II. 7})$$

Здесь $u(f), v(f)$ — вещественные функции, связанные соотношением

$$\begin{aligned} u^2(f) + v^2(f) &= 1, \\ u^2(f) &= \frac{1 + \sigma_3(f)}{2}; \quad v^2(f) = \frac{1 - \sigma_3(f)}{2}. \end{aligned} \quad (\text{II. 8})$$

Из (II. 7) следует, в частности, что линейное преобразование не является каноническим для операторов Паули.

III. ПРИЧИННАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА ДЛЯ СВОБОДНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Как и в основном тексте, мы будем называть свободным электромагнитное поле в однородной диэлектрической среде, характеризуемой скалярными диэлектрической и магнитной проницаемостями, ϵ и μ ; скорость света c есть скорость света в данной среде. По определению причинная функция Грина есть

$$D_{c,\alpha\beta}^{(0)}(x, x') = -i \langle T \{ A_\alpha(x) A_\beta(x') \} \rangle. \quad (\text{III. 1})$$

Усреднение здесь производится по состояниям свободного электромагнитного поля. В частности, при $T=0$ это есть усреднение по основному состоянию поля — вакууму свободных фотонов. Этим случаем мы в дальнейшем и ограничимся. Поскольку потенциал $A_\alpha(x)$ удовлетворяет уравнению Даламбера, легко убедиться, что функция (III. 1) есть одно из решений уравнения

$$\square D_{c,\alpha\beta}^{(0)}(x, x') = -\frac{i}{c^2} \delta(x_0 - x'_0) \left\langle \left[\frac{\partial A_\alpha(x)}{\partial x_0}, A_\beta(x') \right]_- \right\rangle. \quad (\text{III. 2})$$

В силу (I.34) правая часть (III. 2) есть $g_{\alpha\beta} \delta(x - x')$. Для формулировки граничных условий, выделяющих нужное нам решение, представим (III. 1) в спектральной форме типа (3.19), (3.20):

$$D_{c,\alpha\beta}^{(0)}(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-iE(x_0 - x'_0)} D_{c,\alpha\beta}^{(0)}(x, x'; E), \quad (\text{III. 3})$$

$$D_{c,\alpha\beta}^{(0)}(x, x'; E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \left\{ \frac{J_1(x, x'; E')}{E' - E - i\epsilon} - \frac{J_2(x, x'; E')}{E' - E + i\epsilon} \right\}, \quad (\text{III. 4})$$

где

$$\begin{aligned}
 J_1(x, x'; E') &= \\
 &= \sum_n (\Phi_0^{(0)}, A_\alpha(x, 0) \Phi_n^{(0)}) (\Phi_n^{(0)}, A_\beta(x', 0) \Phi_0^{(0)}) \delta(E' - E_n),
 \end{aligned}
 \tag{III. 5}$$

$$\begin{aligned}
 J_2(x, x'; E') &= \\
 &= \sum_n (\Phi_0^{(0)}, A_\beta(x', 0) \Phi_n^{(0)}) (\Phi_n^{(0)}, A_\alpha(x, 0) \Phi_0^{(0)}) \delta(E' + E_n).
 \end{aligned}
 \tag{III. 6}$$

Здесь уже принято во внимание, что усреднение производится по вакууму свободных фотонов, волновая функция которого есть $\Phi_0^{(0)}$, а энергия принята за нуль. Очевидно, $E_n \geq 0$, т. е. функция J_1 содержит только положительные частоты, а J_2 — только отрицательные. Подставляя (III. 4) в (III. 3) и интегрируя по E , видим, что функция $D_c^{(0)}(x, x')$ при $x'_0 < x_0$ содержит только положительные частоты, а при $x'_0 > x_0$ — только отрицательные. Это и есть искомое граничное условие (условие Фейнмана). Представляя $D_c^{(0)}(x, x')$ в виде четырехмерного разложения Фурье и пользуясь уравнением (III. 2) с граничным условием Фейнмана, получаем формулы (5.35) и (5.38).

Заметим, что с помощью спектрального представления типа (III. 4) (но при $T \neq 0$) легко найти функцию $D_c^{(0)}(x, x')$ и в общем случае, когда тепловое излучение принимается во внимание.

IV. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МНОГОВРЕМЕННЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА ¹⁾

Рассмотрим тройное произведение вида

$$K(x, x', x'') = \langle C_1(x) C_2(x') C_3(x'') \rangle. \quad (\text{IV. 1})$$

В состоянии термодинамического равновесия эта величина зависит только от разностей временных аргументов. Положим $x_0 - x'_0 = t$, $x'_0 - x''_0 = t'$. Поступая точно по образцу § 2, имеем

$$\begin{aligned} K(x, x', x'') &= \\ &= \sum_{n, m, l} p_n (\Phi_n, C_1(x) \Phi_m) (\Phi_m, C_2(x') \Phi_l) (\Phi_l, C_3(x'') \Phi_n) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE dE' e^{-iEt - iE't'} J(\lambda, \lambda', \lambda''; E, E'), \end{aligned} \quad (\text{IV. 2})$$

где спектральная функция J дается равенством

$$\begin{aligned} J(\lambda, \lambda', \lambda''; E, E') &= \sum_{n, m, l} p_n (\Phi_n, C_1(\lambda, x_0=0) \Phi_m) \times \\ &\times (\Phi_m, C_2(\lambda', x'_0=0) \Phi_l) (\Phi_l, C_3(\lambda'', x''_0=0) \Phi_n) \times \\ &\times \delta(E - E_m + E_n) \delta(E' - E_l + E_n). \end{aligned} \quad (\text{IV. 3})$$

Наряду с (IV. 1) введем функции, в известном смысле аналогичные ранее введенным запаздывающим и опережающим:

$$\begin{aligned} K_1(x, x', x'') &= \theta(t) \theta(t') K(x, x', x''), \\ K_2(x, x', x'') &= \theta(-t) \theta(-t') K(x, x', x''), \\ K_3(x, x', x'') &= -\theta(-t) \theta(t') K(x, x', x''), \\ K_4(x, x', x'') &= -\theta(t) \theta(-t') K(x, x', x'') \end{aligned} \quad (\text{IV. 4})$$

($\theta(t) = 1$, $t > 0$, $\theta(t) = 0$, $t < 0$).

¹⁾ См. [12].

Полагая

$$K_i(x, x', x'') = \int_{-\infty}^{+\infty} dE dE' K_i(\lambda, \lambda', \lambda''; E, E') e^{-iEt - iE't'} \\ (i = 1, 2, 3, 4) \quad (\text{IV. 5})$$

и опуская для краткости аргументы $\lambda, \lambda', \lambda''$, легко находим

$$K_1(E, E') = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega d\omega' \frac{J(\omega, \omega')}{(E - \omega + i\varepsilon)(E' - \omega' + i\varepsilon')}, \\ K_2(E, E') = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega d\omega' \frac{J(\omega, \omega')}{(E - \omega - i\varepsilon)(E' - \omega' - i\varepsilon')}, \quad (\text{IV. 6})$$

$$K_3(E, E') = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega d\omega' \frac{J(\omega, \omega')}{(E - \omega - i\varepsilon)(E' - \omega' + i\varepsilon')}, \\ K_4(E, E') = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega d\omega' \frac{J(\omega, \omega')}{(E - \omega + i\varepsilon)(E' - \omega' - i\varepsilon')}.$$

Рассматривая E и E' как комплексные переменные, видим, что $K_1(E, E')$ есть аналитическая функция в области $\text{Im } E > 0, \text{Im } E' > 0$; $K_2(E, E')$ — в области $\text{Im } E < 0, \text{Im } E' < 0$ и т. д. Таким образом, совокупность $\{K_1, K_2, K_3, K_4\}$ можно рассматривать как единую аналитическую функцию $\mathcal{K}$ двух комплексных переменных E и E' с особенностями (типа линий разреза) при $\text{Im } E = 0, \text{Im } E' = 0$. Спектральную функцию J легко выразить через предельные значения $\mathcal{K}$ при стремлении мнимых частей E и E' к нулю. Именно, на основании (IV. 6) при вещественных E и E' легко находим

$$J(E, E') = \mathcal{K}(E + i\varepsilon, E' + i\varepsilon') + \mathcal{K}(E - i\varepsilon, E' - i\varepsilon') - \\ - \mathcal{K}(E - i\varepsilon, E' + i\varepsilon') - \mathcal{K}(E + i\varepsilon, E' - i\varepsilon') \equiv \\ \equiv K_1(E, E') + K_2(E, E') - K_3(E, E') - K_4(E, E') \quad (\text{IV. 7}) \\ (\varepsilon, \varepsilon' > 0, \varepsilon, \varepsilon' \rightarrow 0).$$

Обратимся теперь к причинной функции

$$K_c = \langle T \{ C_1(x) C_2(x') C_3(x'') \} \rangle, \quad (\text{IV. 8})$$

Для ее вычисления требуется знать спектральные функции для тройных произведений операторов, взятых в различном порядке. Снабдим рассмотренную ранее функцию индексом (1, 2, 3) сверху и обозначим через $J^{(2, 1, 3)}$ и т. д. спектральные функции для соответствующих произведений. Пользуясь формулой (IV. 3), легко установить справедливость равенств

$$J^{(2, 3, 1)}(E, E') = e^{\beta E'} J^{(1, 2, 3)}(-E', E - E'), \quad (\text{IV. 9})$$

$$J^{(3, 1, 2)}(E, E') = e^{\beta E} J^{(1, 2, 3)}(E' - E, -E) \quad (\text{IV. 10})$$

и

$$J^{(1, 3, 2)}(E, E') = e^{\beta E'} J^{(2, 1, 3)}(-E', E - E'), \quad (\text{IV. 11})$$

$$J^{(3, 2, 1)}(E, E') = e^{\beta E} J^{(2, 1, 3)}(E' - E, -E). \quad (\text{IV. 12})$$

Таким образом, причинная функция (IV. 8) выражается, вообще говоря, через две спектральные функции: $J^{(1, 2, 3)} \equiv J_1$ и $J^{(2, 1, 3)} \equiv J_2$ [вторую из них можно найти по способу, аналогичному (IV. 7)]. Заметим, однако, что в частном случае $C_2 = C_1$, $C_3 \in \text{Re}$ мы имеем $J_2 = \bar{J}_1$.

Обозначим, как и раньше, через η_{ij} знаковый множитель, равный $+1$ или -1 в зависимости от четности или нечетности перестановки ферми-операторов, в результате которой из $C_i C_j$ получается $C_j C_i$ ($i, j = 1, 2, 3$). На основании (IV. 9) — (IV. 12) легко находим

$$K_c(x, x', x'') = \int_{-\infty}^{+\infty} dE dE' e^{-iEt - iE't'} K_c(\lambda, \lambda', \lambda''; E, E'), \quad (\text{IV. 13})$$

где

$$K_c(E, E') =$$

$$= \left(\frac{i}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega d\omega' \left\{ J_1(\omega, \omega') \left[\frac{1}{(E - \omega + i\varepsilon)(E' - \omega' + i\varepsilon')} - \right. \right. \\ - \eta_{12}\eta_{13} \frac{e^{-\beta\omega}}{(E - \omega' + \omega - i\varepsilon)(E' - E + \omega' + i\varepsilon')} - \\ - \eta_{23}\eta_{13} \frac{e^{-\beta\omega'}}{(E - E' + \omega + i\varepsilon)(E' - \omega + \omega' - i\varepsilon')} \left. \right] - \\ - J_2(\omega, \omega') \left[\frac{1}{(E - E' - \omega + \omega' + i\varepsilon)(E' - \omega' - i\varepsilon')} + \right. \\ + \eta_{23} \frac{e^{-\beta\omega}}{(E - \omega' + \omega + i\varepsilon)(E' - E + \omega' - i\varepsilon')} - \\ \left. \left. - \eta_{12}\eta_{13}\eta_{23} \frac{e^{-\beta\omega'}}{(E + \omega' - i\varepsilon)(E' - \omega + \omega' - i\varepsilon')} \right] \right\}. \quad (\text{IV. 14})$$

Функция $K_c(E, E')$, естественно, не аналитична.

Совершенно аналогично можно рассмотреть и n -временные структуры. В условиях равновесия они будут зависеть от $(n-1)$ временных аргументов. Соответственно надо ввести 2^{n-1} «запаздывающих» и «опережающих» функций K_i ($i=1, \dots, 2^{n-1}$). Фурье-образ каждой из них, будучи представлен $(n-1)$ -мерным интегралом типа Коши, окажется аналитической функцией $(n-1)$ переменных, $E_1, \dots, E_{n-1}$ (в области с соответствующими знаками мнимых частей $E_1, \dots, E_{n-1}$). Совокупность всех K_i образует единую аналитическую функцию $\mathcal{K}$ с линиями разреза вдоль гиперплоскостей $\text{Im } E_i = 0$ ($i=1, \dots, n-1$). Подобно (IV. 7), спектральную функцию $J(E_1, \dots, E_{n-1})$ можно выразить через предельные значения $\mathcal{K}$ при стремлении мнимых частей E_i к нулю всеми возможными способами.

V. УРАВНЕНИЕ БЕТЕ—САЛЬПЕТЕРА

В этом приложении мы получим в явном виде уравнение для двухчастичной функции Грина

$$G_{2c}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = i \langle T \{ a(x_1) a(x_2) \bar{a}(x'_1) \bar{a}(x'_2) \} \rangle = \\ = \lim_{J \rightarrow 0} G_{2c}(x_1, x_2; x'_1, x'_2; J), \quad (V. 1)$$

$$G_{2c}(x_1, x_2; x'_1, x'_2; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x_1) a(x_2) \bar{a}(x'_1) \bar{a}(x'_2) S \} \rangle, \\ S = T \left\{ \exp \left(i \int J(x) \Phi(x) dx \right) \right\}.$$

Проведем выкладки для системы ферми-частиц, взаимодействующих с квантовым полем. На основании приложения I, п. д) результаты, таким путем полученные, можно будет непосредственно перенести и на случай систем с прямым взаимодействием.

Обозначим через $F(x) - ig\Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J(x)}$ оператор, стоящий в левой части уравнения (8.8). Пользуясь уравнением движения для оператора $a(x)$ и поступая точно по образцу §§ 7 и 8, найдем

$$\left\{ F(x_1) - ig\Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \right\} G_{2c}(x_1, x_2; x'_1, x'_2; J) = \\ = -i\delta(x_1 - x'_1) G_c(x_2, x'_2; J) + i\delta(x_1 - x'_2) G_c(x_2, x'_1; J). \quad (V. 2)$$

Отсюда

$$\int dx'_2 G_c^{-1}(x_2, x'_2) \left\{ F(x_1) - ig\Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \right\} G_{2c}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = \\ = -i\delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) + i\delta(x_1 - x'_2) \delta(x_2 - x'_1). \quad (V. 3)$$

Для дальнейшего удобно воспользоваться символической записью, рассматривая все фигурирующие здесь величины как матрицы. Уравнение (V. 3) при этом принимает вид

$$G_2^{-1} \left(F_1 - i g \Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J_1} \right) G_{12} = -i I_{12}, \quad (\text{V. 3a})$$

где I_{12} — матрица с элементами

$$\begin{aligned} (x_1, x_2 | I_{12} | x'_1, x'_2) = \\ = \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) - \delta(x_1 - x'_2) \delta(x_2 - x'_1). \end{aligned}$$

Индексы 1 и 2 указывают, на какие именно переменные (x_1 или x_2) действует данная матрица (индекс «с» можно опустить, ибо мы имеем дело сейчас только с причинными функциями).

На основании (9.7) мы имеем

$$G_1^{-1} = -F_1 + M_1, \quad (\text{V. 4})$$

где M_1 — массовый оператор. Следует подчеркнуть, что массовый оператор по определению действует только в пространстве динамических переменных с соответствующим индексом; в то же время функциональная производная в (V. 3) действует, конечно, на функции от любых переменных. По этой причине операторы $i g \Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J}$ и M_1 совпадают лишь в пространстве функций, аргументы которых содержат только один индекс; в случае же, сейчас рассматриваемом, их отождествлять нельзя. Иначе говоря, второй сомножитель в левой части (V. 3a) мы представим в форме

$$F_1 - i g \Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J} = -G_1^{-1} + M_1 - i g \Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J}. \quad (\text{V. 5})$$

Соответственно уравнение (V. 3a) примет вид

$$G_2^{-1} \left(G_1^{-1} - M_1 + i g \Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J} \right) G_{12} = i I_{12}. \quad (\text{V. 6})$$

С другой стороны, всегда можно написать

$$(G_1^{-1} G_2^{-1} - V_{12}) G_{12} = i I_{12}, \quad (\text{V. 7})$$

где V_{12} — оператор, определяемый этим равенством. Очевидно, он описывает взаимодействие между частицами (в отсутствие взаимодействия матрица G_{12} с точностью до множителя совпадала бы с антисимметризованным произведением $G_1 G_2$). Выразив произведение $V_{12} G_{12}$ через функции Грина и вершинные части, мы получим для G_{12} уравнение типа (9.7), в чем как раз и состоит наша задача.

Сравнивая (V. 6) и (V. 7), получаем

$$\begin{aligned} V_{12} G_{12} &= -ig G_2^{-1} \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_{12}}{\delta J} + G_2^{-1} M_1 G_{12} = \\ &= G_2^{-1} M_1 G_{12} - ig \Gamma^{(0)} \frac{\delta}{\delta J} (G_2^{-1} G_{12}) + ig \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_2^{-1}}{\delta J} G_{12}. \end{aligned}$$

На основании (V. 7)

$$\frac{\delta}{\delta J} (G_2^{-1} G_{12}) = G_1 \frac{\delta}{\delta J} (V_{12} G_{12}) - G_1 \frac{\delta G_1^{-1}}{\delta J} G_2^{-1} G_{12}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} V_{12} G_{12} &= G_2^{-1} M_1 G_{12} + ig \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_2^{-1}}{\delta J} G_{12} - \\ &- ig \Gamma^{(0)} G_1 \frac{\delta}{\delta J} (V_{12} G_{12}) + ig \Gamma^{(0)} G_1 \frac{\delta G_1^{-1}}{\delta J} G_2^{-1} G_{12}. \quad (\text{V. 8}) \end{aligned}$$

На основании (9.5) и (9.4) можем написать

$$M_1 = -ig \Gamma^{(0)} G_1 \frac{\delta G_1^{-1}}{\delta J},$$

и, следовательно, первое и четвертое слагаемые в (V. 8) взаимно уничтожаются. Второе слагаемое можем переписать в виде

$$ig \Gamma^{(0)} \frac{\delta G_2^{-1}}{\delta J} G_{12} = ig^2 \Gamma_1^{(0)} \Gamma_2 D_2' G_{12}.$$

Таким образом,

$$V_{12} G_{12} = ig^2 \Gamma_1^{(0)} \Gamma_2 D_2' G_{12} - ig \Gamma_1^{(0)} G_1 \frac{\delta}{\delta J} (V_{12} G_{12}). \quad (\text{V. 9})$$

Это есть уравнение для $V_{12} G_{12}$, которое можно решать,

например, итерациями. В частности, в первом приближении второе слагаемое можно отбросить, и мы получаем

$$V_{12}G_{12} \cong ig^2\Gamma_1^{(0)}\Gamma_2^{(0)}D'_2G_{12}, \quad (\text{V. 10})$$

или, явно выписывая все аргументы,

$$\begin{aligned} \int dx_3 dx_4 V_{12}(x_1, x_2; x_3, x_4) G_{2c}(x_3, x_4; x'_1, x'_2) = \\ = ig^2\Gamma_1^{(0)}\Gamma_2^{(0)}D'_c(x_1, x_2) G_{2c}(x_1, x_2; x'_1, x'_2). \end{aligned} \quad (\text{V. 10a})$$

При этом уравнение (V. 7) принимает вид

$$\begin{aligned} \int G_c^{-1}(x_1, x') G_c^{-1}(x_2, x'') G_{2c}(x', x''; x'_1, x'_2) dx' dx'' - \\ - ig^2\Gamma_1^{(0)}\Gamma_2^{(0)}D'_c(x_1, x_2) G_{2c}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = \\ = i\delta(x_1 - x'_1)\delta(x_2 - x'_2) - i\delta(x_1 - x'_2)\delta(x_2 - x'_1). \end{aligned} \quad (\text{V. 11})$$

В качестве граничных условий к (V. 11) (в нерелятивистском случае), по-видимому, удобнее всего использовать требование представимости функции G_{2c} в виде (IV. 14).

Уравнение (V. 7) [и, следовательно, (V. 11)] получено нами для любой температуры. При $T=0$ оно превращается в хорошо известное в квантовой теории поля уравнение для связанных состояний [13]—[16]. В частности, если в духе аппроксимации (V. 10) заменить в (V. 11) G_c и D'_c на $G_c^{(0)}$ и $D_c^{(0)}$, то при $T=0$ мы получим так называемое уравнение Бете—Сальпетера [13] (выведенное названными авторами

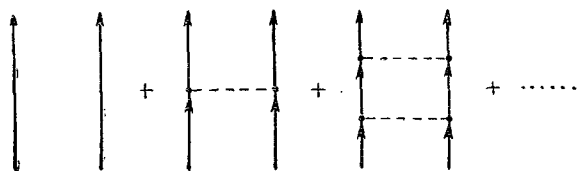


Рис. 9.

для случая квантовой электродинамики). Пользуясь правилами приложения I, легко изобразить это уравнение графически. Именно, функция G_{2c} , ему удовлетворяющая, представляет собой результат суммирования диаграмм, показанных на рис. 9. Диаграммы такого типа называются иногда «лест-

ничными»; соответственно об аппроксимации (V. 10) говорят как о «лестничной».

Равенство (I. 62) позволяет немедленно перенести уравнение (V. 11) на случай систем с прямым взаимодействием: следует лишь произвести во втором слагаемом замену

$$g^2 D_c^{(0)}(x_1', x_2) \rightarrow \delta(x_{1,0} - x_{2,0}) U(x_1 - x_2). \quad (\text{V. 12})$$

Нетрудно получить также уравнение типа (V. 7) (или (V. 11)) для системы бозе-частиц. Действительно, свойство антисимметрии S_{2c} мы явно использовали лишь один раз при вычислении правой части (V. 3). Отсюда следует, что в бозевском случае достаточно лишь изменить знак второго слагаемого в правой части (V. 7) (или (V. 11)).

VI. МАССОВЫЙ ОПЕРАТОР И ВЕРШИННАЯ ЧАСТЬ ДЛЯ СИСТЕМ С ПРЯМЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Массовый оператор и вершинную часть для системы частиц с прямым бинарным взаимодействием можно ввести в полной формальной аналогии со случаем взаимодействия через поле (§ 9). Удобно воспользоваться координатным представлением, исходя из равенств (8.20а) — (8.23а). При этом для компактности мы введем величины

$$U'(x - x'') = U(x - x'') \delta(x_0 - x''_0), \quad (\text{VI. 1})$$

$$F'(x, x') = F(x, x') \delta(x_0 - x'_0), \quad (\text{VI. 2})$$

$$\Psi(x, x') = -i \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta F(x, x')}. \quad (\text{VI. 3})$$

Тогда

$$S = T \left\{ \exp \left(i \int dz dz' F'(z, z') \bar{a}(z) a(z') \right) \right\}, \quad (\text{VI. 4})$$

а уравнение (8.23а) принимает вид

$$\begin{aligned} & \left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) \right\} G_c(x, x') + \\ & + \int dx'' F'(x, x'') G_c(x'', x') - \\ & - \frac{1}{2} \int dx'' U'(x - x'') \left\{ -i \frac{\delta G_c(x, x')}{\delta F(x'', x'')} \pm i \frac{\delta G_c(x'', x')}{\delta F(x'', x)} + \right. \\ & + G_c(x, x') \Psi(x'', x'') \mp \\ & \left. \mp G_c(x'', x') \Psi(x'', x) \right\} = -\delta(x - x'). \quad (\text{VI. 5}) \end{aligned}$$

Для краткости функциональная зависимость G_c от F явно не указывается, но подразумевается; верхний знак для частиц Ферми, нижний — Бозе.

Как и в § 9, произведем замену функционального аргумента, полагая

$$\frac{\delta G_c(x'', x')}{\delta F(x'', x)} = - \int du dv dz dz' G_c(x'', u) \frac{\delta G_c^{-1}(u, v)}{\delta \Psi(z, z')} \times \\ \times G_c(v, x') \frac{\delta \Psi(z, z')}{\delta F(x'', x)}. \quad (\text{VI. 6})$$

Введем обозначения

$$\frac{\delta G_c^{-1}(u, v)}{\delta \Psi(z, z')} = \Gamma(u, v; z, z'), \quad (\text{VI. 7})$$

$$\frac{\delta \Psi(z, z')}{\delta F(x'', x)} = D(z, z'; x'', x). \quad (\text{VI. 8})$$

Величины (VI. 7) и (VI. 8) представляют собой, очевидно, аналоги вершинной части и полевой функции Грина (с чем и связаны их обозначения). Из дальнейшего будет видно, что эта аналогия носит не только формальный, но и более глубокий характер: функция D окажется связанной с двух-частичной функцией Грина (5.24), полюсы которой, как мы знаем, описывают «парные» возбуждения системы.

На основании (VI. 6) — (VI. 8) уравнение (VI. 5) можно переписать в виде

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) \right\} G_c(x, x') + \\ + \int dx'' F'(x, x'') G_c(x'', x') - \\ - \int dy M(x, y) G_c(y, x') = - \delta(x - x'), \quad (\text{VI. 9})$$

где массовый оператор $M(x, y)$ определяется равенством

$$M(x, y) = \frac{i}{2} \int dx'' dz dz' dz'' U'(x - x'') \{ G_c(x, z) \times \\ \times \Gamma(z, y; z', z'') D(z', z''; x'', x'') - \\ - G_c(x'', z) \Gamma(z, y; z', z'') D(z', z''; x'', x) \} - \\ - \frac{1}{2} U'(x - y) \Psi(y, x) + \\ + \frac{1}{2} \int dx'' U'(x - x'') \Psi(x'', x'') \delta(x - y). \quad (\text{VI. 10})$$

Такая форма записи массового оператора удобна при решении уравнения (VI. 9) методом итераций (по образцу § 11). По-

лучим прежде всего первое приближение для «вершинной части», считая формально, что величина U' пропорциональна некоему малому параметру α . Как и в § 11, эта операция носит чисто формальный характер; фактически параметр разложения можно найти только с помощью методики типа группы перенормировки. Умножая уравнение (VI.9) матрично на G_c^{-1} , получаем

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu - T_x - V(x) \right\} \delta(x - x') - M(x, x') + F'(x, x') = \\ = -G_c^{-1}(x, x'),$$

откуда в силу (VI.7) и (VI.10)

$$\Gamma(u, v; z, z') = \frac{1}{2} \{ U'(u - v) \delta(v - z) \delta(u - z') - \\ - U'(u - z') \delta(z - z') \delta(u - v) \} - \frac{\delta F'(u, v)}{\delta \Psi(z, z')} + O(\alpha^2). \quad (\text{VI.11})$$

Далее, для функции D мы получаем, явно выполняя варьирование в (VI.8) и (VI.3) и полагая затем $F = 0$:

$$D(z, z'; x'', x) = -i \{ \langle T \{ a(z) a(z') a(x) \bar{a}(x'') \} \rangle - \\ - G_c(x, x'') G_c(z', z) \}. \quad (\text{VI.12})$$

В силу (VI.1) и (VI.2) фактически всегда $z'_0 = z_0$ и $x''_0 = x_0$, и следовательно, первое слагаемое в фигурной скобке тесно связано с функцией (5.24), как и отмечалось выше.

Из формулы (VI.12) следует, что введение массового оператора, вообще говоря, не избавляет нас от необходимости определять двухчастичную функцию Грина того или иного типа. Иначе говоря, уравнение (VI.9), как и (7.7), не является «замкнутым»¹⁾. Разница состоит, однако, в конкретной форме двухчастичных функций Грина, входящих в то и другое уравнение, что может оказаться существенным при использовании того или иного приближенного метода решения.

¹⁾ Так же обстоит дело, конечно, и для системы частиц, взаимодействующих с квантовым полем: в уравнении для G_c фигурирует и полевая функция Грина D_c .

Согласно определению (VI.8) мы имеем

$$\int \frac{\delta F(u, v)}{\delta \Psi(z, z')} D(z, z'; u, v) dz dz' = \delta(u - v) \delta(v - v'). \quad (\text{VI.13})$$

Далее в нулевом приближении

$$D(z, z'; x'', x) = -i G_c(z'', x'') G(x, z).$$

На основании (VI.10), (VI.11) и (VI.13) видим, что в первом приближении массовый оператор дается формулой

$$M_1(x, y) = - \int dx'' U'(x - x'') \{ \delta(x'' - y) \Psi(x'', x) - \\ - \delta(x - y) \Psi(x'', x'') \}. \quad (\text{VI.14})$$

Принимая во внимание (VI.1) и (8.24a) и обозначая, как всегда, среднюю концентрацию частиц в точке x через $n(x)$, получаем окончательно

$$M_1(x, y) = - \{ U(x - y) \rho_1(y, x; x_0) - \\ - \int dx' U(x - x') n(x') \delta(x - y) \} \delta(x_0 - y_0). \quad (\text{VI.15})$$

При этом ρ_1 и n следует вычислять с помощью функций Грина нулевого приближения.

Во втором приближении массовый оператор складывается из двух членов

$$M_2(x, y) = M'_2(x, y) + M''_2(x, y). \quad (\text{VI.16})$$

Первое слагаемое M'_2 получается итерацией формулы (VI.15) (в качестве ρ_1 и n следует взять результат первого приближения). Второе слагаемое M''_2 происходит от первого члена в правой части (VI.11) и имеет вид

$$M_2(x, y) = - \int dz dz' U(x - z) U(y - z') \times \\ \times \{ G_c(x, x_0; z', y_0) G_c(z', y_0; z, x_0) G_c(z, x_0; y, y_0) - \\ - G_c(z, x_0; z', y_0) G_c(z', y_0; z, x_0) G_c(x, x_0; y, y_0) \}. \quad (\text{VI.17})$$

В качестве G_c здесь следует взять функцию нулевого приближения (т. е. вычисленную в отсутствие взаимодействия).

ЛИТЕРАТУРА

К введению

1. J. Schwinger, Proc. Nat. Acad. Sci. 37, 452, 455 (1951). (Имеется перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 3, ИЛ, 1955.)
2. Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, М., 1947.
3. L. Van Hove, Physica 21, 901 (1955); 22, 343 (1956). (Имеется перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)
4. N. M. Hugenholtz, Physica 23, 481 (1957). (Имеется перевод в сборнике «Проблемы современной физики, № 3, ИЛ, 1958.)
5. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ 28, 121 (1955); 30, 342 (1956).
6. G. Källén, Helv. Phys. Acta 25, 417 (1952).
7. H. Lehmann, Nuovo Cimento 11, 324 (1954).
8. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ 31, 522 (1956).
9. В. М. Галицкий, А. Б. Мигдал, ЖЭТФ 34, 139 (1958).
10. В. М. Галицкий, ЖЭТФ 34, 151 (1958).
11. Л. П. Горьков, ЖЭТФ 34, 735 (1958).
12. С. Т. Беляев, ЖЭТФ 34, 417, 433 (1958).
13. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ 32, 399 (1957); 34, 1438 (1958).
14. A. Klein, R. P. Grange, Phys. Rev. 112, 994, 1008 (1958). (Имеется перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 3, ИЛ, 1959.)
15. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, ЖЭТФ 35, 1558 (1958).
16. T. Matsubara, Progr. Theor. Phys. 14, 351 (1956).
17. В. Л. Бонч-Бруевич, Ш. М. Коган, ФТТ 1, 1221 (1959).
18. Ш. М. Коган, ДАН СССР 126, 546 (1959).
19. Ш. М. Коган, ФТТ 2, 1186 (1960).
20. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ДАН СССР 126, 53 (1959).
21. В. Л. Бонч-Бруевич, Ш. М. Коган, Ann. of Phys. 9, 125 (1960).
22. В. Л. Бонч-Бруевич, ДАН СССР 126, 539 (1959).
23. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ 34, 262 (1958); 35, 957 (1958).
24. Е. С. Фрадкин, ЖЭТФ 36, 1286 (1959).

25. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ 36, 900 (1959).
26. P. C. Martin, J. Schwinger, Phys. Rev. 115, 1342 (1959).

К главе I

1. J. Neumann, Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Berlin, 1932.
2. Н. Н. Боголюбов, Лекции по квантовой статистике, Изд. «Советская школа», Киев, 1949. (на укр. языке).
3. Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, М., 1947.
4. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ 31, 522 (1956).
5. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ 34, 262 (1958).
6. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ДАН СССР 126, 53 (1959).
7. Ш. М. Коган, ДАН СССР 126, 546 (1959).
8. В. Л. Бонч-Бруевич, Ш. М. Коган, App. of Phys. 9, 125 (1960).
9. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, Введение в теорию квантованных полей, Гостехиздат, М., 1957.
10. Н. Н. Боголюбов, Б. В. Медведев, М. К. Поливанов, Вопросы теории дисперсионных соотношений, Физматгиз, М., 1958.
11. И. И. Привалов, Введение в теорию функций комплексного переменного, 7-е издание, Гостехиздат, М. — Л., 1945.

К главе II

1. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, Введение в теорию квантованных полей, Гостехиздат, М., 1957.
2. Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, М., 1947.
3. Н. Н. Боголюбов, Лекции по квантовой статистике, Изд. «Советская школа», Киев, 1949 (на укр. языке).
4. J. Schwinger, Proc. Nat. Acad. Sci. 37, 542, 455 (1951).
5. Ш. М. Коган, ФТТ 2, 1186 (1960).
6. A. Klein, R. Prange, Phys. Rev. 112, 994 (1958).
7. Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов, ДАН СССР 126, 53 (1959).
8. В. Л. Бонч-Бруевич и Ш. М. Коган, App. of Phys. 9, 125 (1960).
9. В. З. Бланк, В. Л. Бонч-Бруевич, Д. В. Ширков, ЖЭТФ 33, 265 (1957).
10. F. Dyson, Phys. Rev. 75, 1736 (1949).
11. E. C. G. Stueckelberg, A. Petermann, Helv. Phys. Acta 24, 153 (1953).
12. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, ДАН СССР 103, 203, 391 (1955).
13. Д. И. Блохинцев, Введение в квантовую механику, Гостехиздат, М., 1951.

14. J. C. Ward, Phys. Rev. 78, 182 (1950).
15. В. Л. Бонч-Бруевич, ДАН СССР 126, 539 (1959).
16. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ 30, 342 (1956).
17. В. Л. Бонч-Бруевич, ФММ 4, 546 (1957).
18. Л. Д. Ландау, А. А. Абрикосов, И. М. Халатников, ДАН СССР 95, 1177 (1954).
19. Н. Н. Боголюбов, А. А. Логунов, Д. В. Ширков, ЖЭТФ 37, 805 (1959).
20. Л. В. Овсянников, ДАН СССР 109, 1121 (1956).
21. В. М. Галицкий, ЖЭТФ 34, 151 (1958).
22. С. Т. Беляев, ЖЭТФ 34, 433 (1958).
23. В. В. Толмачев, С. В. Тябликов, ЖЭТФ 34, 66 (1958).
24. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ЖЭТФ 19, 251 (1949).
25. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, Вестник МГУ, № 3, 35 (1949).
26. P. C. Martin, J. Schwinger, Phys. Rev. 115, 1342 (1959).
27. Е. С. Фрадкин, ЖЭТФ 36, 951; 1286 (1959).
28. В. З. Бланк, Д. В. Ширков, Nucl. Phys. 2, 356 (1956).

К главе III

1. В. Л. Бонч-Бруевич, ФММ 7, 174 (1959).
2. Ш. М. Коган, ДАН СССР 126, 546 (1959); ФТТ 2, 1186 (1960).
3. В. Л. Бонч-Бруевич, Укр. матем. журнал № 3 (1961).
4. В. М. Галицкий, А. Б. Мигдал, ЖЭТФ 34, 139 (1958).
5. С. Т. Беляев, ЖЭТФ 34, 417 (1958).
6. N. M. Hugenholtz, D. Pines, Phys. Rev. 116, 489 (1959).
7. Г. Вентцель, Введение в квантовую теорию волновых полей, Гостехиздат, М., 1947.
8. В. Л. Бонч-Бруевич, ДАН СССР 126, 539 (1959).
9. P. C. Martin, J. Schwinger, Phys. Rev. 115, 1342 (1959).
10. R. P. Feynman, Phys. Rev. 94, 262 (1954).
11. R. Kubo, Journ. Phys. Soc. Jap. 12, 570 (1957).
12. С. И. Пекар, ЖЭТФ 16, 933 (1946).
13. J. C. Slater, Phys. Rev. 76, 1592 (1949).
14. C. Kittel, Mitchell, Phys. Rev. 96, 1488 (1954). (Перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957.)
15. J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1955). (Перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957.)
16. Д. Н. Зубарев, УФН 71, 71 (1960).
17. С. В. Тябликов, ФТТ 2, 361 (1960).
18. М. И. Клингер, ФТТ 1, 674 (1959).
19. H. V. Callen, T. A. Welton, Phys. Rev. 83, 34 (1951).
20. Н. Н. Боголюбов, Б. В. Медведев, М. К. Поливанов, Вопросы теории дисперсионных соотношений, Физматгиз, М., 1958.
21. R. Kronig, Journ. Opt. Soc. Am. 12, 547 (1926).
22. H. A. Kramers, Atti. Congr. Intern. Fisici. Como 2, 545 (1927).
23. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ 36, 924 (1959).
24. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Статистическая физика (классическая и квантовая), Гостехиздат, М., 1951.

25. С. В. Вонсовский, Сборник памяти акад. С. И. Вавилова, Изд. АН СССР, 1952, стр. 363.
26. В. Л. Бонч-Бруевич, УФН 56, 55 (1955).
27. J. M. Luttinger, J. C. Ward, Phys. Rev. 118, 1417 (1960).
28. A. Klein, Phys. Rev. 121, 950 (1961).

К главе IV

1. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, ЖЭТФ 31, 63 (1956).
2. Я. Г. Дорфман, ДАН СССР 81, 765 (1951).
3. G. Dresselhaus, A. F. Kip, C. Kittel, Phys. Rev. 100, 618 (1955).
4. В. Л. Гуревич, ЖЭТФ 37, 71 (1959).
5. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории ионных кристаллов, Гостехиздат, 1951.
6. М. Ф. Дейген, С. И. Пекар, Труды Института физики АН УССР, вып. 7, 108 (1956).
7. J. C. Slater, Phys. Rev. 76, 1592 (1949).
8. J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1955).
9. C. Kittel, M. Mitchell, Phys. Rev. 96, 1488 (1954).
10. D. Pines, Статья в сборнике: Solid State Physics, vol. 1, New York, 1956.
11. D. Pines, Rev. Mod. Phys. 28, 184 (1956)¹⁾.
12. Д. Н. Зубарев, ЖЭТФ 25, 548 (1953).
13. Н. Каназав, Progr. Theoret. Phys. 13, 227 (1955).
14. E. N. Adams, Phys. Rev. 98, 947 (1955).
15. P. Nozières, D. Pines, Phys. Rev. 109, 741, 762, 1062 (1958).
16. В. Л. Бонч-Бруевич, Изв. АН СССР, сер. физ. 21, 87 (1957).
17. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ 32, 1092 (1957).
18. Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, ЖЭТФ 28, 129 (1955).
19. P. Wolff, Phys. Rev. 92, 18 (1953).
20. В. Л. Бонч-Бруевич, ФММ 4, 546 (1957).
21. В. Л. Бонч-Бруевич, ФММ 6, 590 (1958).
22. K. Savada, K. A. Brueckner, O. N. Fukuda, R. Brout, Phys. Rev. 108, 50 (1957).
23. R. Brout, Phys. Rev. 108, 515 (1957).
24. С. Н. Гершман, В. Л. Гинзбург, Н. Г. Денисов, УФН 61, 561 (1957).
25. В. Л. Бонч-Бруевич, ФММ 6, 769 (1958).
26. В. Л. Бонч-Бруевич, Ш. М. Коган, Физика твердого тела 1, 1921 (1959).
27. В. Л. Бонч-Бруевич, А. Г. Миронов, Физика твердого тела 2, 489 (1960).
28. С. И. Пекар, ЖЭТФ 35, 522 (1958).
29. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ 16, 574 (1946).
30. В. Л. Бонч-Бруевич, ФММ 7, 448 (1958).

¹⁾ В статьях [10] и [11] имеются ссылки на предыдущие работы Бома и Пайиса.

К главе V

1. В. Л. Бонч-Бруевич, ДАН СССР 126, 539 (1959).
2. В. Л. Бонч-Бруевич, Ш. М. Коган, Annals of Physics 9, 125 (1960).
3. Ш. М. Коган, ДАН СССР 126, 546 (1959).
4. Ш. М. Коган, ФТТ 2, 1186 (1960).
5. Н. Н. Боголюбов, А. А. Логунов, Д. В. Ширков, ЖЭТФ 37, 805 (1959).
6. В. Л. Бонч-Бруевич, В. Б. Гласко, ДАН СССР 124, 1015 (1959).
7. В. Л. Бонч-Бруевич, В. Б. Гласко, Вестник МГУ 5, 91 (1958).
8. Ф. Ф. Волькенштейн, В. Б. Сандомирский, сборник «Проблемы кинетики и катализа» 8, 189, Изд. АН СССР, М. (1955).
9. Н. J. Engell, в книге Halbleiterprobleme, Bd. 1 (1954).
10. Ф. Ф. Волькенштейн, УФН, 50, 253 (1953).
11. Ф. Ф. Волькенштейн, Изв. АН СССР, сер. хим. № 5, 788; № 6, 972 (1953).
12. В. Л. Бонч-Бруевич, Физика твердого тела (сборник статей), том 2, Изд. АН СССР, М., 1959, стр. 177.
13. G. L. Pearson, J. Bardeen, Phys. Rev. 79, 865 (1949).
14. Б. И. Давыдов, И. М. Шмушкевич, УФН 24, 21 (1940).
15. С. И. Пекар, М. А. Кривоглаз, сборник памяти С. И. Вавилова, стр. 334, Изд. АН СССР, М. (1952).
16. В. Л. Бонч-Бруевич, ДАН СССР 124, 1233 (1959).
17. A. Overhauser, Phys. Rev. 89, 689 (1953).
18. J. Bardeen, Phys. Rev. 52, 688 (1937).
19. J. Bardeen, D. Pines, Phys. Rev. 99, 1140 (1955).
20. С. И. Пекар, ЖЭТФ 18, 225 (1948).

К главе VI

1. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ДАН СССР 126, 53 (1959).
2. В. Л. Бонч-Бруевич, ФТТ 2, 1857 (1960).
3. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории ионных кристаллов, Гостехиздат, 1952.
4. Н. Н. Боголюбов, Укр. матем. журнал 2, 4 (1950).
5. С. В. Тябликов, ЖЭТФ 21, 397 (1951).
6. С. И. Пекар, ЖЭТФ 16, 341 (1946).
7. H. Fröhlich, Phys. Rev. 79, 845 (1950).
8. Н. Н. Боголюбов, ЖЭТФ 34, 58 (1958).
9. J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 106, 162 (1957); 108, 1175 (1957).
10. С. В. Тябликов, ДАН УССР, № 4, 239 (1951).
11. A. Radkowsky, Phys. Rev. 73, 749 (1947).
12. H. Fan, Phys. Rev. 82, 900 (1951).

13. H. Fröhlich, Proc. Roy. Soc. A215, 291 (1952).
14. G. Wentzel, Phys. Rev. 83, 168 (1952).
15. В. В. Толмачев, С. В. Тябликов, ЖЭТФ 34, 1254 (1958).
16. Д. Н. Зубарев УФН 71, 71 (1960).
17. Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников НДВШ, физ. мат. науки, № 2, 133 (1959).
18. Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, Новый метод в теории сверхпроводимости, Изд. АН СССР, М., 1958.
19. Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, ДАН СССР 117, 788 (1957).
20. Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, ЖЭТФ 39, 120 (1960).
21. Н. Н. Боголюбов, К вопросу о модельном гамильтониане в теории сверхпроводимости, препринт ОИЯИ (1960).
22. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ 34, 1438 (1958).
23. В. Шокли, Теория электронных полупроводников, ИЛ, 1953.
24. С. И. Пекар, М. Ф. Дейген, ЖЭТФ 21, 803 (1951).

К главе VII

1. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ДАН СССР 126, 53 (1959).
2. С. В. Тябликов, Укр. матем. журнал 11, 287 (1959).
3. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, Изв. АН СССР, серия физ. 21, 849 (1957).
4. F. Bloch, Z. Phys. 61, 1293 (1929).
5. F. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217, 1230 (1956).
6. W. Oreschowsky, Physica 25, 476 (1959).
7. См., например, С. В. Вонсовский, Я. С. Шур, Ферромагнетизм, Гостехиздат (1948).
8. W. Oreschowsky, Physica 4, 715 (1937).
9. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ЖЭТФ 19, 256 (1949).
10. С. В. Тябликов, ФТТ 2, 361 (1960).
11. Сб. «Ферромагнитный резонанс», ИЛ, 1958.
12. T. Oguchi, Progr. Theoret. Phys. 17, 659 (1957).
13. C. Kittel, Phys. Rev. 73, 155 (1948).
14. С. В. Тябликов, ФТТ 2, 2009 (1960).
15. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, «Электродинамика сплошных сред», Физматгиз, М., 1959, стр. 316.
16. R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap. 12, 570 (1957).
17. Д. Н. Зубарев, УФН 71, 71 (1960).
18. R. Kubo, K. Tomita, J. Phys. Soc. Jap. 9, 888 (1954).
19. W. Bloembergen, Phys. Rev. 78, 572 (1950).
20. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Sow. Phys. 8, 157 (1935).
21. Пу Фу-чо, ДАН СССР 130, 1244; 131, 546 (1960).

К приложениям

1. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, Введение в теорию квантованных полей, Гостехиздат, 1957.
 2. В. Б. Берестецкий, УФН **46**, 231 (1952).
 3. Р. Р. Феупманн, Phys. Rev. **76**, 749, 769 (1949). (Имеется перевод в сборнике «Новейшее развитие квантовой электродинамики», ИЛ, 1954.)
 4. G. C. Wick, Phys. Rev. **80**, 268 (1950). (Имеется перевод в сборнике «Новейшее развитие квантовой электродинамики», ИЛ, 1954.)
 5. F. Dyson, Phys. Rev. **75**, 1736 (1949). (Имеется перевод в сборнике «Новейшее развитие квантовой электродинамики», ИЛ, 1954.)
 6. P. J. Redmond, Phys. Rev. **112**, 1404 (1958).
 7. Н. Н. Боголюбов, А. А. Логунов, Д. В. Ширков, ЖЭТФ **37**, 805 (1959).
 8. J. M. Jauch, K. M. Watson, Phys. Rev. **74**, 950, 1485 (1948); **75**, 1247 (1949).
 9. М. И. Рязанов, ЖЭТФ **32**, 1244 (1957).
 10. С. В. Тябликов, ФММ **2**, 193 (1956).
 11. Н. Н. Боголюбов, ЖЭТФ **34**, 73 (1958).
 12. В. Л. Бонч-Бруевич, ДАН СССР **129**, 529 (1959).
 13. E. Salpeter, H. Bethe, Phys. Rev. **84**, 1232 (1951). (Имеется перевод в сборнике «Новейшее развитие квантовой электродинамики», ИЛ, 1954, стр. 334.)
 14. M. Gell-Mann, F. Low, Phys. Rev. **84**, 350 (1951). (Имеется перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 10, ИЛ, 1955.)
 15. J. Schwinger, Proc. Nat. Acad. Sci. **37**, 459, 451 (1951). (Имеется перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 3, ИЛ, 1955.)
 16. М. К. Поливанов, Дипломная работа, МГУ, 1954.
-

