Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 1 — 1963

Н. Н. БОГОЛЮБОВ (мл.), Б. И. САДОВНИКОВ

ФУНКЦИИ ГРИНА И ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Получена цепочка «зацепляющихся» уравнений для функций Грина в задачах квантовой статистики методом варьирования системы уравнений для функций распределения с применением теоремы о «вариации среднего значения динамической величины».

Целью настоящей работы является установление связи между уравнениями для обычных «одновременных функций распределения» и уравнениями для двухвременных функций Грина.

Мы распространим здесь на квантовый случай методику, разработанную нами [1] для статистической механики классических систем.

Также как и в классическом случае, мы покажем, что уравнения для двухвременных функций Грина могут быть получены варьированием уравнений для функций распределения по бесконечно малому внешнему полю.

Рассмотрим динамическую систему из N одинаковых Ферми частиц со спином σ, находящихся в объеме V, с бинарным взаимодействием, для которой полный гамильтониан в представлении вторичного квантования будет иметь обычную форму:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{(\sigma)}\int_{(V)} \overset{+}{\Psi}(\vec{r},\sigma)\,\Delta\Psi(\vec{r},\sigma)\,d\vec{r} + \frac{1}{2}\sum_{(\sigma_1\sigma_2)}\int_{(V)} \Phi(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\,\overset{+}{\Psi}(\vec{r}_1,\sigma_1)\,\overset{+}{\Psi}(\vec{r}_2,\sigma_2)\,\Psi(\vec{r}_2,\sigma_2)\,\Psi(\vec{r}_1,\sigma_1)\,d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2. \tag{1}$$

Здесь σ — спиновой индекс, полевые Ферми-операторы $\Psi(\vec{r},\sigma)$, $\overset{+}{\Psi}(\vec{r},\sigma)$ выражаются известными «квазидискретными суммами»

$$\Psi(\vec{r},\sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{(k)} a_{k,\sigma} e^{i(\vec{k}\vec{r})}, \quad \overset{+}{\Psi}(\vec{r},\sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{(k)} a^{+}_{k,\sigma} e^{-i(\vec{k}\vec{r})},$$

в которых

$$\vec{k} = \left\{\frac{2\pi}{L}n_x;\quad \frac{2\pi}{L}n_y;\quad \frac{2\pi}{L}n_z\right\};\quad L^3 = V$$

n_x, n_y, n_z — положительные и отрицательные целые числа,
$a^+_{k,\sigma}$; $a_{k,\sigma}$ — квантовые амплитуды рождения и уничтожения частиц с импульсом $\hbar\vec{k}$ и спином σ, обладающие обычными перестановочными соотношениями.

Условимся обозначать через $<\mathfrak{A}>$ среднее значение некоторого динамического оператора по большому Гиббсовскому ансамблю.

$$\langle\mathfrak{A}\rangle = Q^{-1} Sp\mathfrak{A} e^{-\frac{H-\lambda N}{\theta}}; \quad Q = Spe^{-\frac{H-\lambda N}{\theta}},$$

где $\bar{\lambda}$ — химический потенциал.

Иногда будет удобно для сокращения записи обозначать совокупность $(\bar{r}, \sigma)$ одной буквой x или y и положить

$$\int \{\ldots\} dx = \sum_{(\sigma)} \int_{(V)} \{\ldots\} d\vec{r}.$$

Введем двухвременные функции Грина

$$\begin{aligned} &G^{ret}_s (t-\tau;\ x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s;\ y, y'), \\ &G^{adv}_s (t-\tau;\ x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s;\ y, y'), \qquad (2) \\ &G^{c}_s (t-\tau;\ x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s;\ y, y'), \end{aligned}$$

определив их с помощью формул

$$G^{ret}(t-\tau) = \langle\langle A(t), B(\tau)\rangle\rangle^r = \theta(t-\tau)\ \langle [A(t);\ B(\tau)]\rangle,$$

$$G^{adv}(t-\tau) = \langle\langle A(t), B(\tau)\rangle\rangle^{adv} = -\theta(\tau-t)\ \langle [A(t);\ B(\tau)]\rangle,$$

$$[A;\ B] = \frac{AB-BA}{i\hbar},$$

$$G^{c}(t-\tau) = \langle\langle A(t), B(\tau)\rangle\rangle^{c} = \frac{1}{i\hbar}\langle T(A(t)B(\tau))\rangle =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\{\theta(t-\tau)\langle A(t)B(\tau)\rangle + \theta(\tau-t)\langle B(\tau)A(t)\rangle\},$$

в которых положено

$$B(\tau) = \overset{+}{\Psi}(\tau, y)\,\Psi(\tau, y'), \qquad (3)$$

$$A(t) = \overset{+}{\Psi}(t, x'_1)\ldots\overset{+}{\Psi}(t, x'_s)\,\Psi(t, x_s)\ldots\Psi(t, x_1).$$

Здесь $\Psi(t,x)$, $\overset{+}{\Psi}(t,x)$ определяются уравнениями движения с гамильтонианом «большого ансамбля» $(H-\lambda N)$ и начальными условиями

$$\Psi(0, x) = \Psi(x).$$

$\Psi(x)$ — соответствующий оператор в представлении Шредингера. Поскольку операторы $A(t)$ и $B(\tau)$ коммутируют с оператором числа частиц N, то $\Psi(t,x)$ и $\overset{+}{\Psi}(t,x)$ можно определить уравнениями движения с гамильтонианом H

$$i\hbar \frac{d\,\Psi(t,x)}{dt} = \Psi(t,x)\,H - H\Psi(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}}\Psi(t,x) +$$

Ф верно

$$+\int \Phi(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\overset{+}{\Psi}(t,x')\,\Psi(t,x')\,dx'\,\Psi(t,x).$$

Дело в том, что $\Psi(t,x)$ для $(H-\lambda N)$ и $\Psi(t,x)$ для H отличается лишь фазовым множителем $e^{-i\lambda t}$, который в выражениях (3) компенсируется (так как в A и B содержится одинаковое число операторов рождения и уничтожения).

Обозначим через $\mathfrak{G}_s(E, x_1 \ldots x_s;\ x_1' \ldots x_s',\ y, y')$ функцию комплексного переменного E, определенную по формуле

$$\mathfrak{G}(E) \equiv \langle\langle A, B \rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega)\,\frac{e^{\frac{\omega\hbar}{\theta}}-1}{\hbar}\,\frac{d\omega}{E-\omega},$$

через которую выражаются фурье — образы в «E-представлении» введенных функций Грина (2).

Свяжем теперь эти функции с обычными одновременными функциями распределения или, лучше сказать, с матричными элементами статистических операторов комплексов S-частиц:

$$\langle \overset{+}{\Psi}(t, x_1') \ldots \overset{+}{\Psi}(t, x_s')\,\Psi((t, x_s) \ldots \Psi(t, x_1) \rangle.$$

Рассмотрим для этого вспомогательную задачу о системе, гамильтониан которой явно зависит от времени:

$$H' = \sum_{1 \leqslant j \leqslant N} \Gamma_j(t) + \sum_{1 \leqslant j_1 < j_2 \leqslant N} \Phi(\vec{r}_{j_1} - \vec{r}_{j_2}),$$

или, в представлении вторичного квантования

$$H' = \int \overset{+}{\Psi}(x)\,\Gamma(t, x, x')\,\Psi(x')\,dx\,dx' +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{(\sigma_1\sigma_2)}\int_V \Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\,\overset{+}{\Psi}(\vec{r}_1\sigma_1)\,\overset{+}{\Psi}(\vec{r}_2, \sigma_2)\,\Psi(\vec{r}_2, \sigma_2)\,\Psi(\vec{r}_1\sigma_1)\,d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2. \tag{4}$$

Возьмем «функции распределения»

$$D_1(t;\ x_1, x_1') = \langle \overset{+}{\Psi}(t, x_1')\,\Psi(t, x_1) \rangle,$$

$$D_2(t, x_1, x_2, x_1', x_2') = \langle \overset{+}{\Psi}(t, x_1')\,\overset{+}{\Psi}(t, x_2')\,\Psi(t, x_2)\,\Psi(t, x_1) \rangle,$$

. . . .

В отличие от предыдущего средняя здесь $\langle \mathfrak{A} \rangle$ может браться сейчас по произвольному статистическому оператору $\rho(x_1 \ldots x_N;\ x_1' \ldots x_N')$

$$\langle \mathfrak{A} \rangle = Sp\,\mathfrak{A}\rho.$$

Далее $\Psi(t,x)$, $\overset{+}{\Psi}(t,x)$ — Гейзенберговские представления операторных полевых функций, определяемые уравнениями движения с гамильтонианом H'.

Заметим, что введенные функции D_s отличаются от функций F_s, рассматривающихся в монографии [2] лишь нормировкой: а именно с точностью до членов порядка малости $\frac{1}{N}$, имеем:

$$D_s = n^s F_s; \quad S = 1, 2, \ldots$$

где $n = \frac{N}{V}$. Подчеркнем, что цепочка уравнений для корреляционных функций распределения была выведена в упомянутой монографии в случае, когда индивидуальный гамильтониан Γ не зависит явно от времени. Это ограничение, однако, оказывается совершенно несущественным и те же самые уравнения получаются и в случае, когда $\Gamma = \Gamma(t)$.

Учитывая принятую нормировку для D_s, имеем:

$$i\hbar \frac{\partial D_1}{\partial t} = \Gamma_1(t) D_1 - D_1 \Gamma(t) + \underset{(2)}{\mathrm{Sp}} [\Phi_{1,2} D_2 - D_2 \Phi_{1,2}],$$

$$i\hbar \frac{\partial D_2}{\partial t} = \{\Gamma_1(t) + \Gamma_2(t) + \Phi_{1,2}\} D_2 - D_2 \{\Gamma_1(t) + \Gamma_2(t) + \Phi_{1,2}\} +$$
$$+ \underset{(3)}{\mathrm{Sp}} \{(\Phi_{1,3} + \Phi_{2,3}) D_3 - D_3 (\Phi_{1,3} + \Phi_{2,3})\},$$

. . . .

или в более развернутой форме:

$$i\hbar \frac{\partial D_1(t, x_1, x_1')}{\partial t} = \int \{\Gamma(t, x_1 x'') D_1(t; x'', x_1') - D_1(t, x_1, x'') \Gamma(t, x'', x_1')\} dx'' +$$
$$+ \int \{\Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \Phi(\vec{r}_1' - \vec{r}_2)\} D_2(t; x_1, x_2, x_1', x_2) dx_2,$$

$$i\hbar \frac{\partial D_2(t, x_1, x_2, x_1', x_2')}{\partial t} = \int \{\Gamma(t, x_1, x'') D_2(t, x'', x_2, x_1', x_2') - \tag{5}$$
$$- D_2(t, x_1, x_2, x'', x_2') \Gamma(t, x'', x_1') + \Gamma(t, x_2, x'') D_2(t, x_1, x'', x_1', x') +$$
$$+ D_2(t, x_1, x_2, x_1', x'') \Gamma(t_1 x'', x_2')\} dx'' + \{\Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) -$$
$$- \Phi(\vec{r}_1' - \vec{r}_2')\} D_2(t_1, x_1, x_2, x_1', x_2') + \int \{\Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) + \Phi(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) +$$
$$+ \Phi(\vec{r}_1' - \vec{r}_3) - \Phi(\vec{r}_2' - \vec{r}_3)\} D_3(t, x_1, x_2, x_3, x_1', x_2', x_3) dx_3.$$

Воспользуемся сейчас теоремой о вариации средних значений. Рассмотрим систему с гамильтонианом H', явно зависящим от времени, который отличается от H гамильтониана, не зависящего явно от времени, на бесконечно малый оператор:

$$H' = H + \delta H(t),$$
$$\delta H(t) = e^{-iEt} B\, \delta\xi + e^{iEt} B^* \delta\xi^*.$$

Здесь E — произвольное фиксированное комплексное число $ImE \neq 0$, $\delta\xi$ — бесконечно малое c — число, B — оператор, явно от времени не зависящий. Будем считать, что в случае $ImE>0$ система находится в статистическом равновесии при $t=-\infty$ (возмущение $\delta H\to 0$ при $t\to-\infty$), а в случае $ImE<0$ система находится в состоянии статистического равновесия при $t=+\infty$ (здесь $\delta H\to 0$ при $t\to+\infty$).

Пусть A будет некоторой динамической величиной, которая в представлении Шредингера не зависит явно от времени. Обозначим через $A(t)$ ее представление Гейзенберга $\{A(0)=A\}$. Тогда в обоих упоминавшихся случаях

$$\delta\langle A(t)\rangle=\langle A(t)\rangle_{H_\lambda+\delta H}-\langle A(t)\rangle_{H_\lambda}=2\pi\{e^{iEt}\langle\langle A, B\rangle\rangle_E\delta\xi+ + e^{iEt}\langle\langle A, B^*\rangle\rangle_{-E}\delta\xi^*\}. \quad (6)$$

Входящая в это выражение функция Грина в E — представлении $\langle\langle A,B\rangle\rangle_E$ относится, разумеется, к системе с гамильтонианом H_λ.

Чтобы применить эту теорему к нашей задаче, фиксируем произвольное комплексное число E, $ImE\neq 0$, и рассмотрим ситуацию, когда,

$$\Gamma=\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+\delta\Gamma.$$

$$\delta\Gamma(t, x, x')=e^{-iEt}\Omega(x, x')\,\delta\xi+e^{iEt}\Omega^*(x, x')\,\delta\xi^*,$$

где $\Omega(x, x')$ — произвольная c — функция, $\delta\xi$ — бесконечно малое c — число, тогда

$$\delta H=H'-H=e^{-iEt}\int\overset{+}{\Psi}(y)\,\Psi(y')\,\Omega(y, y')\,dy\,dy'\delta\xi+c.\,c.$$

Определим $D_s(t, x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s)$ следующими граничными условиями:

1. Если $ImE>0$, то при $t=-\infty$

$$D_s(t, x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s)=D^0_s(x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s),$$

где D^0_s — значение D_s, соответствующее статистическому равновесию системы с гамильтонианом H.

2. Если $ImE<0$, то при $t=+\infty$

$$D_s(t, x_1\ldots x_s, x'_1\ldots x'_s)=D^0_s(x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s).$$

Тогда воспользовавшись теоремой о вариации (6), напишем

$$D_s(t_1, x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s)=D^0_s+\delta D_s,$$

$$\delta D_s=2\pi e^{-iEt}\int\mathfrak{G}_s(E, x_1\ldots x_s;\ x'_1\ldots x'_s;\ y, y')\,\Omega(y, y')\,dy\,dy'\delta\xi+c.c.$$

Варьируя рассматриваемые уравнения (5) и подставляя в них выражения для δD_s, найдем окончательно

$$\hbar E\mathfrak{G}_1(E, x_1, x'_1;\ y, y')=-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{\vec{r}_1}-\Delta_{\vec{r}'_1})\,\mathfrak{G}_1(E, x_1, x'_1;\ y, y')+$$

$$+\int\{\Phi(\vec{r}_1-\vec{r}_2)-\Phi(\vec{r}'_1-\vec{r}_2)\}\,\mathfrak{G}_2(E, x_1, x_2, x'_1, x_2;\ y, y')\,dx_2+$$

$$+\frac{1}{2\pi}[\delta(x_1-y)\,D^{(0)}_1(y'_1x'_1)-\delta(x'_1-y')\,D^0_1(x_1, y)];$$

$$\hbar E\mathfrak{G}_2(E, x_1, x_2, x'_1, x'_2;\ y, y')=\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{\vec{r}_1}+\Delta_{\vec{r}_2}-\Delta_{\vec{r}'_1}-\Delta_{\vec{r}'_2})+$$

$$+\Phi(\vec{r}_1-\vec{r}_2)-\Phi(\vec{r}_1'-\vec{r}_2')\}\,\mathfrak{G}_2(E, x_1, x_2, x_1', x_2';\; y, y')+$$
$$+\int\{\Phi(\vec{r}_1-\vec{r}_3)+\Phi(\vec{r}_2-\vec{r}_3)-\Phi(\vec{r}_1'-\vec{r}_3)-$$
$$-\Phi(\vec{r}_2'-\vec{r}_3)\}\,\mathfrak{G}_3(E, x_1, x_2, x_3, x_1', x_2', x_3;\; y, y')\,dx_3+ \tag{7}$$
$$+[\delta(x_1-y)\,D_2^0(y', x_2, x_1', x_2')-\delta(x_1'-y')\,D_2^0(x_1, x_2, y, x_2')+$$
$$+\delta(x_2-y)\,D_2^0(x_1, y, x_1', x_2')-\delta(x_2'-y')\,D_2^0(x_1, x_2, x_1', y)]\,\frac{1}{2\pi}\,;$$

. . . .

Эти же уравнения (7) можно было бы получить непосредственно, без применения теоремы о вариации средних значений, например, взяв выражения G^{ret} и продифференцировав их по t; появившиеся производные $\frac{\partial\Psi(t, x)}{\partial t}$; $\frac{\partial\overset{+}{\Psi}(t, x)}{\partial t}$ полевых функций можно выразить через сами полевые функции с помощью уравнений движения и в полученной таким образом цепочке уравнений для G^{ret} перейти к E-представлению.

Уравнения (7) имеют «зацепляющуюся» структуру — в уравнения для $\mathfrak{G}_s$ входит также $\mathfrak{G}_{s+1}$.

Чтобы получить из (7) замкнутую приближенную систему уравнений для определения функций Грина, нужно произвести в них «расцепление» — приближенно выразить высшую $\mathfrak{G}$ через низшие, например, с помощью асимптотических разложений по степеням малого параметра. Заметим, что расцепление можно проводить как в цепочке уравнений для двухвременных функций Грина (7), так и в уравнениях для одновременных фукций распределения (5).

Следует подчеркнуть, что в каждом конкретном случае выбор расцепления особенно для получения высоких приближений представляет весьма сложную задачу. С другой стороны, при работе с T-произведениями в случае температуры $\Theta = 0$ мы можем воспользоваться диаграммной техникой. Однако при таком подходе возникает вопрос, какие именно диаграммы необходимо просуммировать для получения нужного приближения. Можно, как и в нашей работе [1], провести расцепление непосредственно в уравнениях (5) для одновременных функций распределения, например так, как это делается при выводе кинетических уравнений, а затем применить теорему о вариации средних значений и получить уже замкнутую систему приближенных уравнений для определения рассматриваемых функций Грина. В качестве граничных условий возьмем спектральные представления, которые запишем в виде

$$\mathfrak{G}^{ret}(E) \equiv \langle\langle A, B\rangle\rangle_E^{ret} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega)\,\frac{e^{\frac{\omega\hbar}{\theta}}-1}{\hbar}\,\frac{d\omega}{E+i\varepsilon-\omega}\,,$$
$$\mathfrak{G}^{adv}(E) \equiv \langle\langle A, B\rangle\rangle_E^{adv} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega)\,\frac{e^{\frac{\omega\hbar}{\theta}}-1}{\hbar}\,\frac{d\omega}{F-i\varepsilon-\omega}\,, \tag{8}$$
$$\mathfrak{G}^{c}(E) \equiv \langle\langle A, B\rangle\rangle_E^{c} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega)\left\{\frac{e^{\frac{w\hbar}{\theta}}}{E+i\varepsilon-\omega}-\frac{1}{E-i\varepsilon-\omega}\right\}d\omega.$$

Откуда, например, следует, что

$$\mathfrak{G}^{adv}(E) - \mathfrak{G}^{ret}(E) = iI(E)\,\frac{e^{\frac{E\hbar}{\theta}} - 1}{\hbar},$$

$$\mathfrak{G}^{c}(E) = \frac{e^{\frac{E\hbar}{\theta}}\,\mathfrak{G}^{ret}(E) - \mathfrak{G}^{adv}(E)}{e^{\frac{E\hbar}{\theta}} - 1}.$$

Подчеркнем, что во всех вышенаписанных формулах величина E — вещественна.

В следующей нашей работе мы проанализируем расцепление, соответствующее первому приближению, и получим уравнения Хартри и Фока в методе функций Грина.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И. ЖЭТФ, 43, вып. 8, 677, 1962.

2. Боголюбов Н. Н. Лекции з квантово статистики. «Радянська школа». Киев, 1949.

Поступила в редакцию
2.6 1962 г.

Кафедра
статистической физики и механики