Е. К. Башкиров

МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Самара
2013

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Кафедра общей и теоретической физики

Е. К. Башкиров

МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Утверждено редакционно-издательским советом университета
в качестве электронного учебного пособия

Самара
Издательство «Самарский университет»
2013

УДК 530.1
ББК 22.31
Б33

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. А. В. Горохов

Башкиров, Е. К.

Б33 Методы квантовой статистической физики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Е. К. Башкиров. − Электрон. учебное пособие. − Самара : Изд-во «Самарский университет», 2013. − 66 с. − Режим доступа: http://weblib.samsu.ru/localsrc/ssupress/main.php, ограниченный. − Загл. с экрана.

Учебное пособие составлено в соответствии с программой курса «Физика неравновесных процессов, который читается специалистам и магистрантам физического факультета СамГУ"Теоретическая физика".

Основное внимание уделено методу двухвременных температурных функций Грина и его приложениям к описанию неравновесных процессов в физике твердого тела и квантовой оптики.

Предназначено бакалаврам, студентам (специалистам) и магистрантам физических специальностей университетов, а также может быть интересно аспирантам, научным работникам и преподавателям вузов.

УДК 530.1

ББК 22.31

Оглавление

Предисловие

В настоящем пособии последовательно рассматривается один из методов квантовой статистической физики – метод двухвременных температурных функций Грина и его применение к проблемам физики твердого тела и квантовой оптики. Метод функций Грина является современным аппаратом теоретической физики, который позволяет адекватно описывать большой круг явлений как в области физики высоких энергий и квантовой теории поля, так и в макроскопической физике. Важнейшие величины, характеризующие макроскопическую систему (энергия, термодинамические потенциалы, кинетические коэффициенты и др.), выражаются через функции Грина.

Диаграммная техника для расчета функций Грина, перешедшая из квантовой теории поля оказалась весьма наглядной и эффективной для временных и температурных мацубаровских функций Грина [1-3]. Другим направлением в развитии вычислительных методов в макроскопической физике являетя метод двухвременных температурных запаздывающих и опережающих функций Грина, которые были введены Н.Н.Боголюбовым и С.В.Тябликовым [3]. Метод двухвременных температурных функций Грина изложен в большом числе монографий и обзоров [4-17]. Через двухвременные запаздывающие функции Грина выражаютя кинетические характеристики системы типа электропроводности, поглощение света. С опережающими и запаздывающими функциями Грина связаны корреляционные функции, с помощью которых записываются средние для наблюдаемых величин (число частиц, населенности атомных уровней, энергия, термодинамические потенциалы, намагниченность и др.). Многовременные функции описывают процессы, связанные с нелинейной поляризацией, например двухфотонное поглощение и рассеяние света. Для запаздывающих и опережающих функций Грина нет диаграммной техники и схема вычислений состоит в составлении и решении цепочки зацеляющихся уравнений для гриновских функций. Другой особенностью метода является расцепление высших функций, которое позволяет получить конечную систему уравнений.

Пособие состоит из трех частей. В первой части вводятся двухвременные запаздывающие и опережающие двухвременные температурные функции Грина, исследованы их свойства, найдены уравнения движения и связь их с корреляционными функциями. Здесь же рассмотрены простые примеры, в которых функции Грина использованы для расчета равновесных средних для некоторых моделей квантовой теории твердого тела и квантовой оптики. При этом ввиду ограниченности объема пособия опущены физические рассуждения, необходимые для обоснования конкретной модели и выбора гамильтониана системы. В таких случаях даются исчерпывающие ссылки на литературу для самостоятельного чтения. Во второй части пособия рассмотрены равновесные свойсва более сложных физических моделей и, наконец, в третьей части пособия показаны возможности метода функций Грина для исследования неравновесных состояний и вычисления кинетических коэффициентов. При написании пособия автор находился под влиянием прекрасных монографий Д.Н. Зубарева "Неравновесная статистическая термодинамика", Н.М. Плакиды "Некоторые вопросы квантовой теории твердого тела (Метод двухвременных функций Грина)" и И.А. Квасникова "Квантовая статистика".

1 Двухвременные температурные функции Грина

1.1 Временные корреляционные функции

Среднее значение любой наблюдаемой величины A в квантовой статистической физике записывается в виде

$$\langle A(t)\rangle = Sp\,(A\,\rho(t)), \tag{1}$$

где A – оператор динамической переменной в представлении Шредингера, а $\rho(t)$ – статистический оператор системы, удовлетворяющий квантовому уравнению Лиувилля

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)], \qquad Sp\,\rho(t) = 1, \tag{2}$$

где H – гамильтониан рассматриваемой системы.

Из соображений удобства будем везде в дальнейшем полагать $\hbar \equiv 1$. Если гамильтониан H не зависит явно от времени, формальное решение уравнения (2) можно представить в виде

$$\rho(t) = e^{-i\,H\,t}\,\rho(0)\,e^{i\,H\,t}. \tag{3}$$

Подставляя решение (3) в (1), мы можем представить формулу для среднего в виде

$$\langle A(t)\rangle = Sp\,\left(A\,e^{-i\,H\,t}\,\rho(0)\,e^{i\,H\,t}\right) = Sp\,(A(t)\,\rho(0)) \tag{4}$$

(при записи формулы (4) мы учли свойства инвариантности операции Sp по отношению к циклической перестановке операторов).

Здесь

$$A(t) = e^{i\,H\,t}\,A\,e^{-i\,H\,t}$$

– оператор динамической переменной в представлении Гейзенберга. Уравнение движения для оператора в представлении Гейзенберга имеет вид

$$i\,\frac{\partial A(t)}{\partial t} = [A(t), H]. \tag{5}$$

Для систем с переменным числом частиц удобно вместо гейзенберговского представления для операторов использовать "квазигейзенберговское" представление. Для этого введем в гамильтониан системы оператор числа частиц N

$$\mathcal{H} = H - \mu\,N,$$

где μ – химический потенциал системы. Тогда "квазигейзенберговское" представление можно определить соотношениями

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}t}\,A\,e^{i\mathcal{H}t},$$

$$i\,\frac{\partial A(t)}{\partial t} = [A(t), \mathcal{H}].$$

Как известно, в статистической физике средние (1) вычисляются точно только для сравнительно небольшого класса модельных систем. Во всех остальных случаях приходится использовать для таких вычислений приближенные методы. Оказывается, что во многих случаях проблему вычисления средних удобно свести к проблеме вычисления временных корреляционных функций.

Введем двухвременные корреляционные функции как равновесные средние от операторов в гейзенберговском или "квазигейзенберговском" представлении:

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)\,B(t')\rangle. \tag{6}$$

Здесь $\langle\ldots\rangle = Sp(\ldots\,\rho)$, где ρ представляет собой статистический оператор для канонического или большого канонического ансамблей (в дальнейшем для сокращения записей под H будем понимать либо гамильтониан либо оператор $\mathcal{H}$ в зависимости от рассматриваемой задачи):

$$\rho = Q^{-1}\,e^{\frac{-H}{\theta}}, \qquad \theta = k\,T.$$

В случае статистического равновесия корреляционные функции (6) зависят лишь от разности температур

$$F_{AB}(t-t') = Q^{-1}\,Sp\left\{e^{\frac{-H}{\theta}}\,e^{iHt}\,A\,e^{-iHt}\,e^{iHt'}\,B\,e^{-iHt'}\right\} =$$

$$= Q^{-1}\,sp\left\{e^{\frac{-H}{\theta}}\,e^{iH(t-t')}\,A\,e^{-iH(t-t')}\,B\right\} =$$

$$= \langle A(t-t')\,B\rangle = \langle A\,B(t'-t)\rangle.$$

При совпадающих временах $t = t'$ введенные корреляционные функции определяют равновесные свойства системы. Например, выбирая $A = a_k^+, B = a_k$, где $a_k^+(a_k)$ - операторы рождения (уничтожения) частиц в состоянии k мы получим корреляционную функцию $\langle a_k^+(t)\,a_k(t')\rangle$, которая при совпадающих временах определяет среднее число частиц системы в состоянии k.

При несовпадающих временах временные корреляционные функции определяют вероятности перехода между квантовыми состояниями (см., например, [6]). Данную проблему мы в настоящем пособии затрагивать не будем.

Для нахождения корреляционной функции (6) запишем для нее уравнение движения. Продифференциируем ее по времени t. Тогда, воспользовавшись формулой (5), получаем

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\langle A(t)\,B(t')\rangle = \langle [A(t), H]\,B(t')\rangle. \tag{7}$$

В правую часть уравнения (7) входят, в общем случае, корреляционные функции более высокого порядка, чем исходные. Для новых корреляционных функций также можно записать уравнения типа (7) и т.д. В результате мы получим бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений. Используя те или иные способы расцепления, цепочку уравнений можно замкнуть, получив конечную систему уравнений. Для ее решения необходимо задать граничные условия (типа условий ослабления корреляций в случае классических корреляционных функций). Оказывается, что в квантовом случае гораздо проще решить уравнения движения не для корреляционных функций, а для двухвременных функций Грина, которые представляют собой некоторую комбинацию корреляционных функций, но в отличии от последних не определены при совпадающих временах $t = t'$. В результате этого уравнения для них содержат неоднородность в правой части, что облегчает интеграцию уравнений, а простые спектральные свойства позволяют легко удовлетворить граничным условиям. Таким образом, проблема нахождения равновесных средних значений наблюдаемых величин в квантовой статистике может быть сведена к вычислению двухвременных температурных функций Грина. Двухвременные температурные функции Грина как уже указывалось выше могут быть также использованы при вычисления средних для слабонеравновесных состояний (линейная реакция системы на механические возмущения). Данной проблеме будет посвящена третья часть пособия.

1.2 Запаздывающие, опережающие и причинные функции Грина

В статистической механике, как и в квантовой теории поля, вводят запаздывающие $G^r(t,t')$ $(retarded)$, опережающие $G^a(t,t')$ $(advanced)$ и причинные $G^c(t,t')$ $(causal)$ двухвременные температурные функции Грина

$$G^r(t,t') = \langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^r = -i\,\theta(t-t')\,\langle[A(t), B(t')]_\eta\rangle,$$
$$G^a(t,t') = \langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^a = i\,\theta(t'-t)\,\langle[]A(t), B(t')]_\eta\rangle, \tag{8}$$
$$G^c(t,t') = \langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^c = i\,\langle T A(t), B(t')\rangle.$$

Здесь $\langle\ldots\rangle$ – усреднение по каноническому или большому каноническому ансамблю Гиббса

$$\langle\ldots\rangle = Q^{-1}\,Sp(\ldots\, e^{-\frac{H}{\theta}}), \qquad Q = Sp\, e^{-\frac{H}{\theta}}.$$

Временные аргументы у операторов $A(t), B(t')$ означают гейзенберговское или "квазигейзенберговское" представление:

$$A(t) = e^{i\,H\,t}\,A\,e^{-i\,H\,t}.$$

Символ T – хронологическое произведение операторов:

$$T\,A(t)\,B(t') = \theta(t-t')\;A(t)\,B(t') + \eta\,\theta(t'-t)\,B(t')\,A(t),$$

где $\theta(t)$ – разрывная функция Хевисайда

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

Наконец $[A, B]_\eta$ – коммутатор или антикоммутатор, в зависимости от знака η:

$$[A, B]_\eta = A\,B - \eta\,B\,A$$

т.е. при $\eta = 1$ – коммутатор, а при $\eta = -1$ – антикоммутатор. Знак η выбирается плюс или минус из соображений удобства в задаче. Если A и B – бозе-операторы – обычно выбирается плюс, если ферми-операторы – минус, но возможен и другой выбор знака η.

Отметим, что из-за разрывного множителя $\theta(t-t')$ функции Грина (8) не определены при совпадающих временах $t = t'$. Из определения следует, что применяемые в статистической физике функции Грина отличаются от полевых функций Грина лишь способом усреднения. Вместо усреднения по нижнему, вакуумному состоянию системы производится усреднение по каноническому или большому каноническому ансамблю Гиббса. Следовательно введенные функции Грина зависят как от времени, так и от температуры.

Функции Грина для случая статистического равновесия, также как и корреляционные функции, зависят лишь от разности времен $t - t'$. Из двухвременных функций Грина в статистической физике наиболее удобно использование запаздывающей и опережающей функции Грина G^r и G^a, так как их фурье-компоненты допускают аналитическое продолжение в комплексную плоскость энергии.

Получим систему уравнений для функций Грина (8). Оператор $A(t)$ удовлетворяет уравнению движения вида

$$i\,\frac{\partial A(t)}{\partial t} = [A(t), H]. \tag{9}$$

Дифференциируя функции Грина (8) по времени t, получим уравнение

$$i\,\frac{\partial G(t-t')}{\partial t} = i\,\frac{\partial \theta(t-t')}{\partial t}\,\langle [A(t), B(t')]_\eta\rangle + i\,\langle\langle \frac{\partial A(t)}{\partial t}\,B(t')\rangle\rangle,$$

одинаковое для всех трех функций Грина G^r, G^a, G^c, так как

$$\frac{\partial \theta(-t)}{\partial t} = -\frac{\partial \theta(t)}{\partial t}.$$

Учитывая связь θ-функции с δ-функцией Дирака

$$\frac{\partial \theta(t)}{\partial t} = -\frac{\partial \theta(t')}{\partial t} = \delta(t)$$

и уравнение движения (9) для оператора $A(t)$, запишем уравнение для функции Грина в виде

$$i\,\frac{\partial G(t-t')}{\partial t} = \delta(t-t')\langle [A, B]_\eta\rangle + \langle\langle [A(t), H]; B(t')\rangle\rangle. \tag{10}$$

В правую часть уравнения (10) входят двухвременные функции Грина, вообще говоря, более высокого порядка, чем исходные. Для них можно также составить уравнение типа (10) и получить цепочку зацепляющихся уравнений для функций Грина. Одних этих уравнений еще недостаточно, что очевидно из того, что они одинаковы для всех функций Грина G^r, G^a, G^c, если они построены из одинаковых операторов A и B. Их нужно еще дополнить граничными условиями. Граничные условия для функций Грина формулируются в виде их спектральных свойств.

В последующих разделах мы исследуем спектральные свойства для корреляционных функций и функций Грина и установим связь между ними.

1.3 Спектральные представления корреляционных функций

При решении уравнений движения (10) для функций Грина важно иметь для них спектральные представления, которые дополняют систему уравнений необходимыми граничными условиями. Для получения спектральных представлений для функций Грина нам потребуются некоторые спектральные свойства корреляционных функций. Поэтому в настоящем разделе будут рассмотрены спектральные представления для временных корреляционных функций. Обозначим через E_n и $|\psi_n\rangle$ собственные значения и собственные функции гамильтониана системы

$$H\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle.$$

Тогда для корреляционной функции можем записать

$$F_{BA}(t'-t) = \langle B(t')\,A(t)\rangle = Q^{-1}\sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}\,\langle\psi_n|B(t')\,A(t)|\psi_n\rangle =$$

$$= Q^{-1}\sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}\,\langle\psi_n|e^{i\,H\,t'}\,B\,e^{-i\,H\,t'}|\psi_m\rangle\langle\psi_m|e^{i\,H\,t}\,A\,e^{-i\,H\,t}|\psi_n\rangle =$$

$$= Q^{-1}\sum_{nm} e^{-\frac{E_n}{\theta}}\,\langle\psi_n|\,B\,|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\,A\,|\psi_n\rangle\,e^{-i\,(E_n-E_m)\,(t-t')},$$

где мы воспользовались полнотой собственных функций

$$\sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| = I$$

и учли, что

$$e^{-i\,H\,t}\,|\psi_n\rangle = e^{-i\,E_n\,t}\,|\psi_n\rangle.$$

Выполняя подобное же разложение для корреляционной функции F_{AB}, получим

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)\,B(t')\rangle = Q^{-1}\sum_m e^{-\frac{E_m}{\theta}}\,\langle\psi_m|B(t')\,A(t)|\psi_m\rangle =$$

$$= Q^{-1}\sum_{nm} e^{-\frac{E_m}{\theta}}\,\langle\psi_m|e^{i\,H\,t}\,A\,e^{-i\,H\,t}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|e^{i\,H\,t'}\,B\,e^{-i\,H\,t'}|\psi_m\rangle =$$

$$= Q^{-1}\sum_n e^{-\frac{E_n}{\theta}}\,\langle\psi_n|\,B\,|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\,A\,|\psi_n\rangle\,e^{\frac{E_n-E_m}{\theta}}\,e^{-i\,(E_n-E_m)\,(t-t')}.$$

Вводя теперь фурье-разложение для корреляционных функций вида

$$F_{BA}(t'-t) = \langle B(t')\,A(t)\rangle = \frac{1}{2\,\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega)\,e^{i\,\omega\,(t'-t)}\,d\omega, \qquad (11)$$

$$F_{AB}(t-t') = \langle A(t)\, B(t') \rangle = \frac{1}{2\,\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(\omega)\, e^{i\,\omega\,(t-t')}\, d\omega, \qquad (12)$$

находим

$$J_{BA}(\omega) = Q^{-1}\, 2\,\pi \sum_{nm} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \langle \psi_n |\, B\, | \psi_m \rangle \langle \psi_m |\, A\, | \psi_n \rangle\, \delta(E_n - E_m - \omega), \qquad (13)$$

$$J_{AB}(\omega) = Q^{-1} 2\,\pi \sum_{nm} e^{-\frac{E_n}{\theta}} \langle \psi_n |\, B\, | \psi_m \rangle \langle \psi_m |\, A\, | \psi_n \rangle\, e^{\frac{E_n - E_m}{\theta}}\, \delta(E_n - E_m + \omega), \ (14).$$

Сравнивая (13) и (14) получаем

$$J_{AB}(\omega) = e^{-\frac{\omega}{\theta}}\, J_{BA}(\omega). \qquad (15)$$

1.4 Спектральные представления функций Грина

Рассмотрим теперь спектральные представления для функций Грина. Вначале рассмотрим спектральные свойства запаздывающей функции Грина. Для этого введем фурье-представление для запаздывающей функции Грина

$$G^r_{AB}(t-t') = \frac{1}{2\,\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} G^r_{AB}(E)\, e^{-i\,E\,(t-t')}\, dE, \qquad (16)$$

$$G^r_{AB}(E) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} G^r_{AB}(t)\, e^{i\,E\,t}\, dt. \qquad (17)$$

Для фурье-компоненты функции Грина будем использовать также обозначение $G^r(\omega) \equiv \langle\langle A|B \rangle\rangle_\omega$. Подставим в (17) явное выражение для запаздывающей временной функции Грина

$$G^r(E) = -i \int\limits_{-\infty}^{\infty} \theta(t)\, \{ \langle A(t)\, B \rangle - \eta\, \langle B\, A(t) \rangle \}\, e^{i\,E\,t}\, dt.$$

Используя фурье-представления для корреляционных функций (11) и соотношение (15), получаем

$$G^r_{AB}(E) = -i \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega J_{BA}(\omega) \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) \frac{1}{2\,\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, \theta(t)\, e^{i\,(E-\omega)\,t}\,.$$

Воспользуемся интегральным представлением θ - функции

$$\theta(t) = \int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon\,t}\, \delta(t)\, dt = \frac{i}{2\,\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\,x\,t}}{x + i\,\varepsilon}\, dx \Bigg|_{\varepsilon \to 0^+}. \qquad (18)$$

Соотношение (18) докажем, вычисляя интеграл в правой части. Для этого воспользуемся теоремой о вычетах. Интегрирование по x проведем в комплексной плоскости.

При $t > 0$ контур интегрировани следует замыкать в нижней полуплоскости, где $Im\, x < 0$, и у подинтегральной функции есть полюс $x = -i\,\varepsilon$. Тогда

$$\frac{i}{2\,\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-i\,x\,t}}{x+i\,\varepsilon}\,dx\bigg|_{\varepsilon\to o^+} = \frac{i}{2\,\pi}\,(-2\,\pi\,i)\,e^{-i\,(-i\,\varepsilon)\,t}|_{\varepsilon\to 0^+} = e^{-\varepsilon\,t}|_{\varepsilon\to 0^+} = 1.$$

При $t < 0$ контур необходимо замкнуть в верхней полуплоскости, где нет полюса, и

$$\frac{i}{2\,\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-i\,x\,t}}{x+i\,\varepsilon}\,dx\bigg|_{\varepsilon\to 0^+} = 0.$$

В результате, соотношение (18) доказано.

Интегрируя с помощью (18), получаем

$$-\frac{i}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,\theta(t)\,e^{i\,(E-\omega)\,t} = -\frac{1}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\frac{1}{x+i\,\varepsilon}\,\frac{1}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\,e^{i\,(E-\omega-x)\,t} =$$

$$= \frac{1}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\frac{1}{x+i\,\varepsilon}\,\delta(E-\omega-x) = \frac{1}{2\,\pi}\,\frac{1}{E-\omega+i\,\varepsilon}.$$

Таким образом, фурье-компонента запаздывающей функции Грина имеет представление

$$G^r_{AB}(E) = \frac{1}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\,J_{BA}(\omega)\,\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)\,\frac{1}{E-\omega+i\,\varepsilon}. \qquad (19)$$

Для опережающей функции Грина в интегральном преобразовании (18) нужно произвести замену $\theta(t)\to\theta(-t)$ и, следовательно, $\varepsilon\to-\varepsilon$. В результате получаем

$$G^a_{AB}(E) = \frac{1}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\,J_{BA}(\omega)\,\left(e^{\frac{\omega}{\theta}}-\eta\right)\,\frac{1}{E-\omega-i\,\varepsilon}. \qquad (20)$$

Как можно показать, запаздывающую функцию Грина $G^r_{AB}(E)$ можно аналитически продолжить в верхнюю полуплоскость комплексного переменного E: $ImE > 0$, а опережающую G^a_{AB} в нижнюю полуплоскость $Im\,E < 0$.

Таким образом, можно ввести единую аналитическую функцию комплексного переменного

$$G_{AB}(E) = \begin{cases} G^{r}_{AB}(E) & \text{при} \quad ImE > 0, \\ G^{a}_{AB}(E) & \text{при} \quad ImE < 0, \end{cases}$$

спектральное представление которой имеет вид

$$G_{AB}(E) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, J_{BA}(\omega)\, \frac{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}{E - \omega},$$

где E – комплексная переменная.

Причинные функции Грина определены только на вещественной оси и при $\theta \neq 0$ не могут быть аналитически продолжены в комплексную плоскость, в чем и состоит их неудобство.

Установим теперь связь между функциями Грина и корреляционными функциями. Используя формулу Сохоцкого

$$\frac{1}{x \pm i\,\varepsilon} = P\frac{1}{x} \mp i\,\pi\,\delta(x), \tag{21}$$

где P – символ главного значения при интегрировании в (21), получим

$$G_{AB}(\omega \pm i\,\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} P\frac{d\omega'}{\omega - \omega'}\, J_{BA}(\omega')\, \left(e^{\frac{\omega'}{\theta}} - \eta\right) \mp \frac{i}{2}\, \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta\right)\, J_{BA}(\omega), \tag{22}$$

Откуда получаем для разности

$$\{G_{AB}(\omega + i\,\varepsilon) - G_{AB}(\omega - i\,\varepsilon)\} = -i\, \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta\right)\, J_{BA}(\omega). \tag{23}$$

Формула (23) позволяет по функции Грина $G_{AB}(E)$ восстановить фурье-образ корреляционной функции.

1.5 Правила сумм

Из существования спектральных разложений для функций Грина следуют для них некоторые простые тождества – правила сумм, которые находят приложение в теории неравновесных процессов.

Для запаздывающих функций Грина по определению имеем

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle^{r}_{\omega} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A; B(t)\rangle\rangle^{r}\, e^{-i\,\omega\,t}\, dt.$$

Интегрируя это соотношение по всем ω, получим

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega^r \, d\omega = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \int\limits_{-\infty}^{0} \frac{1}{i} \langle [A, B(t)]_\eta > e^{-i\omega t} \, dt =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{0} \frac{2\,\pi}{i} \langle [A, B(t)]_\eta \rangle \, \delta(t) \, dt. \tag{24}$$

Следовательно для запаздывающих функций Грина имеет место тождество

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega^r \, d\omega = \frac{\pi}{i} \langle [A, B]_\eta \rangle,$$

называемое правилом сумм.

Для опережающих функций Грина справедливо аналогичное соотношение, но с другим знаком в правой части

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega^a \, d\omega = -\frac{\pi}{i} \langle [A, B]_\eta \rangle.$$

Для получения правил сумм другого типа проинтегрируем (24) по частям, полагая $\langle [A, B(t)] \rangle|_{t=-\infty} = 0$. Получим

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega^r = \frac{1}{\omega} \langle [A, B]_\eta \rangle - \frac{1}{\omega} \int\limits_{-\infty}^{0} \langle [A, \dot{B}(t)]_\eta \rangle \, e^{-i\omega t} \, dt,$$

и, следовательно,

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \{\omega \, \langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega^r - \langle [A, B]_\eta \rangle\} \, d\omega =$$

$$-2\,\pi \int\limits_{-\infty}^{0} \langle [A, \dot{B}(t)]_\eta \rangle \, \delta(t) \, dt = -\pi \langle [A, \dot{B}]_\eta \rangle_{t=0} \tag{25}$$

и аналогично для опережающих функций Грина

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \{\omega \, \langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega^a - \langle [A, B]_\eta \rangle\} \, d\omega == \pi \langle [A, \dot{B}]_\eta \rangle_{t=0}.$$

Продолжая далее интегрирование по частям в (24) до членов n-порядка можно получить последовательность правил сумм [5].

1.6 Симметрия функций Грина

Рассмотрим теперь свойства симметрии корреляционных функций и функций Грина.

Из определения запаздывающей и опережающей функций Грина следует, что

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^r = \eta\,\langle\langle B(t'); A(t)\rangle\rangle^a,$$

т.е. запаздывающие функции Грина с коммутатором ($\eta = 1$) равны опережающим функциям Грина того же типа с переставленными операторами, а запаздывающие функции с антикоммутатором ($\eta = -1$) при перестановке операторов переходят в опережающие функции Грина с обратным знаком. Переходя к фурье-компонентам функций Грина

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^r = \frac{1}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\langle\langle A|B\rangle\rangle^r_\omega\, e^{-i\,\omega\,(t-t')}\,d\omega,$$

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^a = \frac{1}{2\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\langle\langle A|B\rangle\rangle^a_\omega\, e^{-i\,\omega\,(t-t')}\,d\omega,$$

получим для них условие симметрии:

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle^r_\omega = \eta\,\langle\langle B|A\rangle\rangle^a_{-\omega}. \qquad (26)$$

Здесь всюду ω вещественна.

Воспользуемся аналитическим продолжением функций Грина в комплексную плоскость и запишем условие симметрии (26) в виде

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle_E = \eta\,\langle\langle B|A\rangle\rangle_{-E}. \qquad (27)$$

Еще одно полезное свойство симметрии получим, взяв комплексное сопряжение от выражений для запаздывающих и опережающих функций Грина:

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^* = \eta\,\langle\langle A^+(t); B^+(t')\rangle\rangle.$$

В частном случае для эрмитовых операторов и коммутаторных функций Грина получим

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^* = \langle\langle A(t); B^(t')\rangle\rangle.$$

Следовательно коммутаторные функции Грина из эрмитовых операторов вещественны.

В случае, когда уравнения движения для операторов инвариантны относительно отражения времени, т.е. относительно замены

$$t \to -t, \qquad t' \to -t', \qquad i \to -i,$$

функции Грина имеют еще некоторые свойства симметрии.

Пусть уравнения движения для A и B инвариантны относительно отражения времени, при котором $A \to \varepsilon_A A, \quad B \to \varepsilon_B B$, где $\varepsilon_A, \varepsilon_B = \pm 1$, в зависимости от четности операторов при обращении скоростей. Рассмотрим спектральное разложение

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(\omega)\, e^{i\omega(t-t')}\, d\omega. \tag{28}$$

При замене $t \to -t, \quad t' \to -t', \quad i \to -i$, левая часть этого равенства умножается на $\varepsilon_A \varepsilon_B$, а в правой части $J_{AB}(\omega)$ переходит в $J^*_{AB}(\omega)$ (вследствие замены i на $-i$). Следовательно, в рассматриваемом случае

$$J_{AB}(\omega) = J^*_{AB}(\omega)\, \varepsilon_A \varepsilon_B,$$

$$J_{AB}(\omega) = J_{AB}(\omega) \qquad \text{при} \qquad \varepsilon_A \varepsilon_B = 1, \tag{29}$$

т.е. спектральная интенсивность вещественна для операторов одинаковой четности.

В предыдущем разделе мы получили основную формулу (23), которая позволяет по фурье-образам функций Грина восстанавливать фурье-образы корреляционных функций. Для операторов одинаковой четности эту формулу тогда можно записать в виде

$$J_{BA}(\omega) = -\frac{2\, Im\, G_{AB}(\omega + i\,\varepsilon)}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}. \tag{30}$$

Сравнивая (28) и сопряженное ему соотношение

$$\langle B^+(t')A^+(t)\rangle = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}\, d\omega,$$

где мы учли вещественность спектральной интенсивности, убеждаемся, что

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \langle B^+(t)A^+(t')\rangle,$$

и, следовательно,

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega = \langle\langle B^+|A^+\rangle\rangle_\omega.$$

1.7 Идеальные квантовые газы

Применим теперь полученные ранее общие соотношения для исследования конкретной системы невзаимодействующих ферми- или бозе-частиц. Гамильтониан такой системы в представлении вторичного квантования можно записать в виде

$$H = \sum_k \varepsilon_k \, a_k^+ \, a_k, \qquad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 \, k^2}{2\, m} - \mu,$$

где a_k^+ и a_k – операторы рождения и уничтожения частиц в квантовом состоянии k, удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[a_k, a_{k'}^+]_\eta = \delta_{k\,k'}; \qquad [a_k, a_{k'}]_\eta = [a_k^+, a_{k'}^+]_\eta = 0,$$

где $\eta = 1$ для бозе-частиц и $\eta = -1$ для ферми-частиц. Введем коммутаторную (для бозе-частиц) или антикоммутаторную (для ферми частиц) запаздывающую функцию Грина

$$G_{k\,k'}(t - t') = \langle\langle a_k(t); a_{k'}^+(t')\rangle\rangle^r = -i\,\theta(t - t')\,\langle [a_k(t), a_{k'}^+(t')]_\eta \rangle. \qquad (31)$$

Уравнение движения для введенной функции Грина имеет вид

$$i\,\frac{\partial}{\partial t} G_{k\,k'}(t - t') = \delta(t - t')\,\langle [a_k, a_{k'}^+]_\eta \rangle + \varepsilon_k\, G_{k\,k'}(t - t').$$

Перейдем в этом уравнении к фурье-компонентам

$$G_{k\,k'}(t - t') = \frac{1}{2\,\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} G_{k\,k'}(\omega)\, e^{-i\,\omega\,(t-t')}\, d\omega,$$

$$\delta(t - t') = \frac{1}{2\,\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-i\,\omega\,(t-t')}\, d\omega.$$

Тогда вместо дифференциального мы получим алгебраическое уравнение вида

$$\omega\, G_{k\,k'}(\omega) = \delta_{k\,k'} + \varepsilon_k\, G_{k\,k'}(\omega).$$

Откуда

$$G_{k\,k'}(\omega) = \frac{\delta_{k\,k'}}{\omega - \varepsilon_k}.$$

Теперь, используя формулу (30), мы можем найти спектральную интенсивность соответствующей корреляционной функции

$$J_{k'k}(\omega) = -\frac{1}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}\, 2\, Im\, \frac{\delta_{k\,k'}}{\omega - \varepsilon_k + i\,\varepsilon} = \frac{2\,\pi\,\delta(\omega - \varepsilon_k)}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}\, \delta_{k\,k'}.$$

Следовательно временная корреляционная функция имеет вид

$$\langle a_{k'}^{+}(t')\, a_k(t)\rangle = \frac{1}{2\,\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, J_{k'k}(\omega)\, e^{-i\,\omega\,(t-t')} = \langle n_k\rangle\, e^{-i\,\varepsilon_k\,(t-t')}\, \delta_{k\,k'}, \qquad (32)$$

где $\langle n_k\rangle = \langle a_k^{+}\, a_k\rangle = 1/(e^{\frac{\varepsilon_k}{\theta}} - \eta)$ – среднее число бозе- ($\eta = 1$) или ферми-частиц ($\eta = -1$). Запаздывающая функция Грина (31) имеет вид

$$\langle\langle a_k(t); a_{k'}^{+}(t')\rangle\rangle^{r} = -i\,\theta(t-t')\, e^{-i\,\varepsilon_k\,(t-t')}. \qquad (33)$$

Как следует из (30) и (33), временные корреляционные функции и функции Грина идеального квантового газа периодичны во времени и не затухают при $|t-t'| \to \infty$. При этом фурье-компонента функции Грина имеет простой полюс при частоте, равной энергии возбуждения системы $\omega_k = \varepsilon_k$.

1.8 Общий вид одночастичной функции Грина. Квазичастицы

Рассмотрим систему взаимодействующих ферми- или бозе-частиц с учетом взаимодействия. Гамильтониан ее в общем виде запишем как

$$H = \sum_{k} \varepsilon_k\, a_k^{+}\, a_k + H_{int},$$

где энергия взаимодействия H_{int} приводит к переходам частиц между уровнями k. Явный вид энергии взаимодействия мы конкретизировать не будем. Уравнение для одночастичной функции Грина

$$G_{k\,k'}(t-t') = \langle\langle a_k(t); a_{k'}^{+}(t')\rangle\rangle$$

примет вид

$$i\,\frac{\partial}{\partial t} G_{k\,k'}(t-t') = \delta(t-t')\,\delta_{k\,k'} + \langle\langle [a_k, H_{int}]; a_{k'}^{+}\rangle\rangle. \qquad (34)$$

Переходя к фурье-компонентам в уравнении (34), получаем алгебраическое уравнение вида

$$(\omega - \varepsilon_k)\, G_{k\,k'}(\omega) = \delta_{k\,k'} + \sum_{k''} M_{k\,k''}(\omega)\, G_{k''k'}(\omega), \qquad (35)$$

где $M_{k\,k'}(\omega)$ – массовый оператор одночастичной функции Грина определяется согласно уравнению

$$\sum_{k'} M_{k\,k'}(\omega)\, G_{k\,k'}(\omega) = \langle\langle [a_k, H_{int}] | a_{k'}^{+}\rangle\rangle_{\omega}.$$

Введем функцию Грина невзаимодействующих частиц

$$G^0_{k\,k'}(\omega) = \delta_{k\,k'}\,\frac{1}{\omega - \varepsilon_k}$$

и запишем уравнение (35) в виде:

$$G_{k\,k'}(\omega) = G^0_{k\,k'}(\omega) + \sum_{k''\,k'''} G^0_{k\,k''}(\omega)\,M_{k''\,k'''}(\omega)G_{k'''\,k'}(\omega),$$

формальное решение которого имеет вид

$$G_{k\,k'}(\omega) = \left\{(G^0_{k\,k'}(\omega))^{-1} - M_{k\,k'}(\omega)\right\}^{-1}. \qquad (36)$$

Рассмотрим диагональную часть функции Грина $k = k'$. Полагая

$$M_{k\,k'}(\omega) \approx \delta_{k\,k'}\,M_k(\omega),$$

получим

$$G_k(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - M_k(\omega)}. \qquad (37)$$

Вводя действительную и мнимую часть массового оператора согласно уравнению

$$M_k(\omega \pm i\,\varepsilon) = \Delta_k(\omega) \mp i\,\Gamma_k(\omega),$$

запишем функцию Грина (37) в виде

$$G_k(\omega \pm i\,\varepsilon) = \frac{1}{\omega - [\varepsilon_k + \Delta_k(\omega)] \pm i\,\Gamma_k(\omega)} \qquad (38).$$

Функция Грина (38) имеет полюс при комплексном значении переменной ω:

$$\omega = \varepsilon_k + \Delta_k(\omega) \pm i\,\Gamma_k(\omega)$$

и разрез вдоль действительной оси. Скачок значений функции при переходе через действительную ось определяет согласно общей формуле (23) спектральную интенсивность:

$$J_k(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}\,\frac{1}{i}\,\{G_k(\omega + i\,\varepsilon) - G_k(\omega - i\,\varepsilon)\} =$$

$$= \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta\right)^{-1} \frac{2\,\Gamma_k(\omega)}{[\omega - (\varepsilon_k + \Delta_k(\omega))]^2 + \Gamma_k^2(\omega)}. \qquad (39)$$

Сравнивая (39) с соответствующей спектральной плотностью идеального газа ферми- или бозе-частиц, легко прийти к выводу, что учет взаимодействия приводит к сдвигу энергии возбуждения, определяемого действительной частью массового оператора $\Delta_k(\omega)$, и к появлению конечной ширины уровня $\Gamma_k(\omega)$, определяемой мнимой частью массового оператора. Таким образом, учет взаимодействия приводит к тому, что время жизни частиц в состоянии "k" становится конечным $\tau_k \sim 1/\Gamma_k$.

В общем случае вычисление массового оператора представляет собой весьма непростую задачу. Здесь же мы рассмотрим системы с достаточно слабым взаимодействием, так что сдвиг энергии возбуждения $\Delta_k(\omega)$ и ширина уровня $\Gamma_k(\omega)$ вблизи энергии $\omega = \tilde{\varepsilon}_k$ малы

$$\Delta_k(\tilde{\varepsilon}_k) \ll \tilde{\varepsilon}_k, \qquad \Gamma_k(\tilde{\varepsilon}_k) \ll \tilde{\varepsilon}_k$$

и возможно следующее разложение функции Грина:

$$G_k(\omega) = \frac{1}{(\omega - \tilde{\varepsilon}_k)(1 - \frac{d\,\Delta_k(\omega)}{d\,\omega}|_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k}) + i\,\Gamma_k(\tilde{\varepsilon}_k)},$$

где перенормированная энергия возбуждения $\tilde{\varepsilon}_k$ определяется из уравнения

$$\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k + \Delta_k(\tilde{\varepsilon}_k).$$

В этом случае спектральная интенсивность (39) принимает вид распределения Лоренца

$$J_k(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\tilde{\varepsilon}_k}{\theta}} - \eta} \left[1 - \frac{d\,\Delta_k(\omega)}{d\,\omega}|_{\tilde{\varepsilon}_k}\right]^{-1} \frac{2\,\tilde{\Gamma}_k}{(\omega - \tilde{\varepsilon}_k)^2 + \tilde{\Gamma}_k^2}$$

с полушириной распределения

$$\tilde{\Gamma_k} = \Gamma_k(\tilde{\varepsilon}_k) \left[1 - \frac{d\,\Delta_k(\omega)}{d\,\omega}|_{\tilde{\varepsilon}_k}\right]^{-1}.$$

Соответствующая запаздывающая функция Грина имеет вид

$$G_k^r(t - t') = \langle\langle a_k(t); a_k^+(t')\rangle\rangle^r = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\,\omega}{2\,\pi}\, e^{-i\,\omega\,(t-t')}\, \frac{\left[1 - \frac{d\,\Delta_k(\omega)}{d\,\omega}|_{\tilde{\varepsilon}_k}\right]^{-1}}{(\omega - \tilde{\varepsilon}_k) + i\,\tilde{\Gamma}_k} =$$

$$= -\,\theta(t - t')\, e^{-\,i\,\tilde{\varepsilon}_k\,(t-t')}\, e^{-\tilde{\Gamma}_k\,(t-t')} \left[1 - \frac{d\,\Delta_k(\omega)}{d\,\omega}|_{\tilde{\varepsilon}_k}\right]^{-1},$$

где контур интегрирования при $t > t'$ следует замыкать в нижней полуплоскости, где имеется полюс функции Грина в точке $\omega = \tilde{\varepsilon}_k - i\,\tilde{\Gamma}_k$, а при $t < t'$ контур замыкается в верхней полуплоскости, не имеющей полюсов, так что $G_k^r(t, t') = 0$. Величины $\tilde{\varepsilon}_k$ действительно определяют энергии одночастичных возбуждений, время жизни которых $\tau_k = 1/\tilde{\Gamma}_k$. Если время жизни $\tau_k \gg 1/\tilde{\varepsilon}_k$, то такое состояние описывает хорошо определенное возбуждение, которое называется квазичастицей (фононы, поляритоны, экситоны, магноны и др.). Заметим, что обычно Δ_k и Γ_k являются функциями температуры системы и поэтому условие $\tilde{\Gamma}_k \ll \tilde{\varepsilon}_k$ может выполняться лишь в определенной области температур и лишь для определенных состояний k. Интегрируя спектральную плотность по частотам, получим среднее число квазичастиц

$$\langle n_k \rangle = \langle a_k^+ \, a_k \rangle \approx \frac{1}{e^{\frac{\tilde{\varepsilon}_k}{\theta}} - \eta}.$$

Перейдем теперь к рассмотрению применения общего формализма метода двухвременных температурных функций Грина к исследованию свойств конкретных моделей.

2 Система двухуровневых атомов в термостате

В квазиспиновом представлении свободный гамильтониан системы N идентичных невзаимодействующих двухуровневых атомов без учета движения центров их масс имеет вид [19]

$$H = \sum_{f=1}^{N} \hbar \Omega R_f^z.$$

Здесь индекс f нумерует излучатели в образце, Ω – частота перехода в двухуровневом атоме, R_f^z – оператор инверсии населенности в f-ом излучателе, $R_f^{\pm}$ – операторы, описывающие переходы в f-ом двухуровневом излучателе и удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[R_f^{\pm}, R_{f'}^z] = \mp R_f^{\pm} \, \delta_{ff'}, \qquad [R_f^+, R_{f'}^-] = 2 \, R_f^z \, \delta_{ff'}.$$

$$R_f^+ = R_f^x + i \, R_f^y$$

– оператор перехода двухуровневого атома из невозбужденного состояния в возбужденное состояние и

$$R_f^- = R_f^x - i \, R_f^y$$

– оператор перехода из возбужденного состояние в невозбужденное состояние.

Кроме того для операторов перехода можно записать следующие полезные соотношения

$$R_f^z = \frac{1}{2} - R_f^- R_f^+, \qquad R_f^z = R_f^+ S_f^- - \frac{1}{2}, \qquad R_f^- R_f^+ + R_f^+ R_f^- = 1.$$

$N_f^+ = R_f^+ R_f^-$ – оператор населенности возбужденного состояния атома и $N_f^- = R_f^- R_f^+$ – оператор населенности основного состояния атома

Для того, чтобы вычислить среднюю равновесную населенность возбужденного уровня введем антикоммутаторную функцию Грина вида

$$G(t-t') = \langle\langle R_f^-(t); R_f^+(t')\rangle\rangle^r = -i\,\theta(t-t')\,\langle[R_f^-(t), R_f^+(t)]_\eta\rangle,$$

где $\eta = -1$. Уравнение движения для введенной функции Грина имеет вид

$$i\,\frac{\partial}{\partial t} G(t-t') = \delta(t-t') + \Omega\, G(t-t'),$$

где мы учли, что $\langle[R_f^-, R_f^+]_{\eta=-1}\rangle = 1$.

Переходя в уравнении к фурье-образам, имеем

$$\omega\, G(\omega) = 1 + \Omega\, G(\omega),$$

откуда

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - \Omega}.$$

Тогда для средней населенности возбужденного уровня в двухуровневом атоме получаем

$$\langle N_f\rangle = 1/(e^{\Omega/k_B T} + 1).$$

3 Ферромагнетизм

Рассмотрим магнитный диэлектрик, состоящий из N одинаковых атомов со спином $S = \frac{1}{2}$, расположенных в узлах кристаллической решетки. Обменное взаимодействие этих спинов может быть описано гейзенберговской моделью

$$H = -h\sum_f S_f^z - \frac{1}{2}\sum_{f\,g\,\alpha} I(\vec{f} - \vec{f'}) S_f^\alpha\, S_{f'}^\alpha, \tag{40}$$

где $h = \mu\, H^z$ - зеемановская энергия магнитного момента μ во внешнем магнитном поле H^z, направленном по оси z, S_f^α - оператор спина в узле решетки f, $\alpha = x, y, z$, $I(\vec{f} - \vec{f'})$ - обменное взаимодействие спинов, которое в однородной решетке зависит лишь от расстояния между узлами

$|\vec{f}-\vec{f'}|$, причем в сумме учитывается взаимодействие только между разными узлами: $f \neq f'$. В случае $I(\vec{f}-\vec{f'}) > 0$ основное состояние системы при температуре $T = 0$ является ферромагнитным. Первое слагаемое в гамильтониане () представляет собой энергию спинов во внешнем магнитном поле, а второе слагаемое описывает энергия обменного взаимодействия спинов.

Операторы спина подчиняются известным коммутационным соотношениям ($\hbar = 1$):

$$[S_f^x, S_{f'}^y] = i\, S_f^z\, \delta_{ff'}$$

и т.д.

Для описания свойств магнетика удобно ввести операторы переворота спина

$$S_f^{\pm} = S_f^x \pm i\, S_f^y, \qquad \left(S_f^+\right)^+ = S_f^-,$$

действие которых на собственные состояния с заданной проекцией спина S_f^z приводит к увеличению или уменьшению проекции спина на $\hbar$. Коммутационные соотношения для этих операторов имеют вид

$$[S_f^+, S_{f'}^-] = 2\, S_f^z\, \delta_{ff'}, \qquad [S_f^{\pm}, S_{f'}^z] = \mp\, S_f^{\pm}\, \delta_{ff'}.$$

Кроме того для операторов переворота можно записать следующие полезные соотношения

$$S_f^z = \frac{1}{2} - S_f^-\, S_f^+, \qquad S_f^z = S_f^+\, S_f^- - \frac{1}{2}, \qquad S_f^-\, S_f^+ + S_f^+\, S_f^- = 1. \tag{41}$$

Для определения спектра элементарных возбуждений магнетика рассмотрим коммутаторную запаздывающую функцию Грина

$$G_{ff'}(t-t') = \langle\langle S_f^+(t); S_{f'}^- \rangle\rangle^r.$$

Запишем для нее уравнение движения

$$i\,\frac{\partial}{\partial t} G_{ff'}(t-t') = \delta(t-t')\langle [S_f^+, S_{f'}^-]_{\eta=1}\rangle + h\, G_{ff'}(t-t') +$$

$$+ \sum_{f''} I(f-f'')\, \langle\langle (S_{f''}^z(t)\, S_f^+(t) - S_f^z(t)\, S_{f''}^+(t));\ S_{f'}^-(t')\rangle\rangle. \tag{42}$$

Переходя к фурье-образам в уравнении (42) получим вместо дифференциальных систему алгебраических уравнений

$$(\omega - h)\, G_{ff'}(\omega) = 2\, \langle S_f^z\rangle\, \delta_{ff'} +$$

$$+\sum_{f''} I(f-f'')\,\langle\langle (S^z_{f''}\,S^+_f - S^z_f\,S^+_{f''})|\,S^-_{f'}\rangle\rangle_\omega. \qquad (43).$$

В правую часть уравнения (43) для двухчастичной функции Грина $G_{ff'}$ входит трехчастичная функция Грина. Для нее мы также можем записать уравнение движения и т.д. В результате получим бесконечную систему зацепляющихся уравнений. Такая проблема, как известно, возникает при описании динамических свойств любой многочастичной системы с взаимодействием. Способ обрыва такой цепочки может быть иногда подсказан конкретным видом гамильтониана задачи; в отдельных случаях, когда гамильтониан взаимодействия содержит малый параметр, процедуру расцепления можно провести регулярным образом с использованием специальной теории возмущений. Однако при построении теории ферромагнетика в широком интервале температур подобные рассуждения теряют силу из-за отсутствия в задаче какого-либо универсального малого параметра. В настоящее время неизвестны какие-либо внутренние критерии "качества" расцепления. Оправданием того или иного расцепления может служить полный анализ термодинамических следствий построенной теории. В настоящем пособии мы рассмотрим одно из простейших расцеплений первого порядка (т.е. расцеплений для трехчастичных функций Грина) – расцепление Тябликова, которое дает качественно верное поведение средней намагниченности во всем температурном интервале. Отметим, что более сложные и на первый взгляд более последовательные расцепления первого порядка (Кэллена, Дембинского и др. [13]) не дают никаких существенных преимуществ по сравнению с теорией Тябликова.

Расцепление Тябликова имеет вид

$$\langle\langle S^z_{f''}\,S^+_f|S^-_{f'}\rangle\rangle \;=\; \langle S^z_{f''}\rangle\langle\langle S^+_f|S^-_{f'}\rangle\rangle, \qquad (f\neq f'') \qquad (44).$$

Физический смысл расцепления (44) состоит в пренебрежении флуктуациями z - компоненты спина, что заведомо плохо в окрестности точки Кюри (и вообще при высоких температурах). Действительно, введем оператор флуктуации z - компоненты спина $\nu_f = S^z_f - \langle S^z_f\rangle$, обладающий очевидным свойством $\langle\nu_f\rangle = 0$. В приближении Тябликова, когда мы заменяем оператор S^z_f его средним значением $\langle S^z_f\rangle \equiv S\sigma$ (σ - относительная намагниченность на один узел) величина

$$\langle\nu_f^2\rangle = \langle (S^z_f)^2\rangle - \langle S^z_f\rangle^2 = 0.$$

Тогда как ее точное значение для $S = \frac{1}{2}$ имеет вид

$$\langle \nu_f^2 \rangle = \frac{1}{4}(1 - \sigma^2).$$

Так, что $\langle \nu_f^2 \rangle \to \langle \nu_f^2 \rangle$ лишь при малых температурах, когда $T \to 0, \sigma \to 1/2$. При высоких температурах и вблизи точки Кюри $\sigma \approx 0$ и $\langle \nu_f^2 \rangle \approx 1/4$ и приближение (44) становится весьма грубым.

При использовании расцепления (44) уравнение (43) становится замкнутым относительно исходной функции Грина

$$(\omega - h)\, G_{ff'}(\omega) = 2\, \langle S_f^z \rangle\, \delta_{ff'} +$$
$$+ \langle S^z \rangle \sum_{f''} I(f - f'')\, \{G_{ff'}(\omega) - G_{f''f'}(\omega)\}\,, \tag{45}$$

где мы учли, что среднее значение спина в узле однородной решетки не зависит от номера узла: $\langle S_{f''}^z \rangle = \langle S^z \rangle = S\, \sigma$. Учитывая теперь, что функция Грина $G_{ff'}$ зависит лишь от расстояния между узлами в случае однородной решетки, представим ее в виде фурье-разложения по векторам обратного пространства (волновым векторам $\vec{q}$):

$$G_{ff'}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q \, e^{i\, \vec{q}\, (\vec{f} - \vec{f'})}\, G_q(\omega). \tag{46}$$

Подставляя разложение (46) в уравнение (45) и учитывая представление символа Кронекера

$$\delta_{ff'} = \frac{1}{N} \sum_q \, e^{i\, \vec{q}\, (\vec{f} - \vec{f'})},$$

получаем решение для коллективной функции Грина $G_q(\omega)$ в виде

$$G_q(\omega) = \frac{2\, \langle S^z \rangle}{\omega - h - E(q)}, \tag{47}$$

где энергия элементарных возбуждений в приближении Тябликова имеет вид

$$E(q) =< S^z \rangle \sum_{f''} \, I(f - f'')\, (1 - e^{-\, i\, \vec{q}\, (\vec{f} - \vec{f''})}) =$$
$$= \frac{1}{2}\, \sigma\, \{J(0) - J(q)\} = \sigma\, E^{(0)}(q). \tag{48}$$

Здесь введена фурье-компонента обменного взаимодействия

$$J(q) = \sum_f e^{-\, i\, \vec{q}\, \vec{f}}.$$

При вычисленииии средней относительной намагниченности при низких температурах нам потребуется знание поведения спектра (48) в длинноволновом приближении $q \to 0$. В этом случае можно провести разложение (48) по q

$$J(0) - J(q) \approx \sum_f I(f) \, \frac{1}{2} (\vec{q} \, \vec{f})^2 = \frac{1}{6} \, q^2 \sum_f I(f) \, f^2$$

и записать энергию возбуждений в виде

$$E(q \to 0) \approx \sigma \, D \, q^2,$$

где константа D определяется выражением

$$D = \frac{1}{12} \sum_f I(f) \, f^2$$

и зависит от типа решетки.

Выражение для коллективной функции Грина (47) позволяет определить корреляционную функцию спинов. Согласно формуле (30) получаем

$$\langle S_{f'}^- \, S_f^+ \rangle = \frac{1}{2\,\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} - 1} \left[-2 \, Im G_{ff'}(\omega + i \, \varepsilon) \right] =$$

$$= \frac{2 \, \langle S^z \rangle}{N} \sum_q e^{i \, \vec{q} (\vec{f} - \vec{f}')} \, N_q, \qquad (49)$$

где

$$N_q = \left[exp \frac{h + E(q)}{\theta} - 1 \right]^{-1}$$

– среднее число возбуждений с энергией $h + E(q)$ при температуре $\theta = k \, T$.

Согласно формуле (41) имеем

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_f^- \, S_f^+ \rangle = \frac{1}{2} - 2 \, \langle S^z \rangle \, P,$$

где, учитывая (49), введена функция температуры

$$P = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{e^{\frac{h + E(q)}{\theta}} - 1}. \qquad (50)$$

Тогда для определения относительной намагниченности σ мы получаем уравнение

$$\sigma = 1 - 2 \, P \, \sigma \qquad (52)$$

или

$$\frac{1}{\sigma} = 1 + 2 \, P = \frac{1}{N} \sum_q \coth \frac{h + E(q)}{2 \, \theta}. \qquad (53)$$

Это уравнение является самосогласованным, так как энергия возбуждения $E(q)$ сама зависит от намагниченности: $E(q) = \sigma\, E^{(0)}(q)$. Решение трансцендентного уравнения (52) может быть найдено только путем численного интегрирования. Однако в предельных случаях низких температур $T \ll T_C$, в ферромагнитной области вблизи температуры Кюри $T_C - T \ll T_C, T < T_C$ и в парамагнитной области для высоких температур $T > T_C$ решения уравнения (52) или (53) могут быть найдены в аналитическом виде.

1. Низкие температуры: $T \ll T_C, \sigma \to 1$.

В случае низких температур намагниченность близка к максимальной ($\sigma < 1, \sigma \simeq 1$), а число возбуждений N_q для каждого q мало: $P \ll 1$. В этом случае уравнение (52) может быть решено методом последовательных итераций:

$$\sigma^{(0)} = 1;$$

$$\sigma^{(1)} = 1 - 2\, P^{(0)}, \qquad P^{(0)} = \frac{1}{N} \sum_q N_q^{(0)}.$$

Для определения величины $P^{(0)}$ перейдем в формуле (50) от суммы к интегралу по q и положим $E(q) \approx E^{(0)}(q)$:

$$P^{(0)} = \frac{v}{(2\,\pi)^3} \int \frac{d\vec{q}}{e^{\frac{h+E^{(0)}(q)}{\theta}} - 1} = \frac{v}{(2\,\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \int d\vec{q}\, e^{-n\,\frac{h+E^{(0)}(q)}{\theta}}, \tag{54}$$

так что

$$P^{(0)}(\theta \to 0) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\,\frac{h}{\theta}}\, \frac{4\,\pi\, v}{(2\,\pi)^3} \int\limits_0^{\infty} q^2\, dq\, e^{-n\frac{D}{\theta}\,q^2} =$$

$$= \left(\frac{\theta}{D}\right)^{3/2} \frac{v}{2\,\pi^2} \int\limits_0^{\infty} x^2\, dx\, e^{-n\,x^2} = \left(\frac{\theta}{4\,\pi\, D}\right)^{3/2} v\, Z^{3/2}\left(\frac{h}{\theta}\right).$$

Здесь

$$Z_p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{h^p}\, e^{-n\,x}, \qquad Z_p(0) = \zeta(p) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p},$$

где $\zeta(p)$ - дзета-функция Римана.

Таким образом, в отсутствие внешнего магнитного поля ($h = 0$) температурная зависимость намагниченности имеет вид

$$\sigma(\theta) \approx 1 - 2\, v\, \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{\theta}{4\,\pi\, D}\right)^{3/2} = 1 - \gamma\, T^{3/2}$$

- закон "3/2" , впервые полученный Блохом.

2. Высокие температуры вблизи точки Кюри $T < T_C$.

Рассмотрим уравнение (53) в нулевом магнитном поле при высоких температурах

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\,\pi)^3} \int d\vec{q}\, \coth \frac{\sigma\, E^{(0)}(q)}{2\,\theta}. \tag{55}$$

В случае достаточно высоких температур, $\theta \gg \sigma\, E(q_{max})$ с помощью разложения

$$\coth x \approx \frac{1}{x} + \frac{1}{3}\, x + \ldots, \qquad (x = \frac{\sigma\, E(q)}{2\,\theta} \ll 1)$$

уравнение (55) можно переписать в виде

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\,\pi)^3} \int d\vec{q} \left\{ \frac{2\,\theta}{\sigma\, E^{(0)}(q)} + \frac{1}{3}\, \frac{\sigma\, E^{(0)}(q)}{2\,\theta} + \ldots \right\}. \tag{56}$$

Как видно из (56), при $\theta \to \infty$ это уравнение имеет лишь одно решение, $\sigma = 0$. При понижении температуры при $\theta = \theta_C$ возникает ненулевое решение $\sigma \ll 1$, которое можно определить, решая (56) методом последовательных итераций. Предварительно определим интегралы в правой части уравнения:

$$\frac{v}{(2\,\pi)^3} \int d\vec{q}\, E^{(0)}(q) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2} \left\{ J(0) - J(q) \right\} = \frac{1}{2}\, J(0),$$

так как

$$\sum_q J(q) = \sum_f I(f) \sum_q e^{-i\,\vec{q}\,\vec{f}} = 0, \qquad I(f=0) = 0.$$

$$\frac{v}{(2\,\pi)^3} \int \frac{d\vec{q}}{E^{(0)}(q)} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{2}{J(0)}\, \frac{1}{1 - J(0)/J(q)} = \frac{2}{J(0)}\, C,$$

где постоянная $1 \le C \le 2$ определяется геометрией решетки.

Подставляя найденные интегралы в (56), приходим к уравнению

$$\frac{1}{\sigma} = C \frac{\tau}{\sigma} + \frac{1}{3}\, \frac{\sigma}{\tau} + O(\sigma^2),$$

где

$$\tau = \frac{4\,k\,T}{J(0)}.$$

Откуда

$$\sigma = \sqrt{3\,\tau\,(1 - C\,\tau)}.$$

При температуре $\tau_C = 1/C$ намагниченность обращается в нуль, а при $\tau \leq \tau_C$ имеет вид

$$\sigma \approx \sqrt{3\,\tau_C\,(1 - \frac{T}{T_C}}),$$

где температура Кюри определяется соотношением

$$k\,T_C = \theta_C = \frac{J(0)}{4}\,\tau_C = \frac{J(0)}{4\,C}.$$

Зависимость намагниченности во всей области температур $0 \leq \theta \leq \theta_C$ может быть получена численным интегрированием уравнения (52).

2. Парамагнитная область $T > T_C$.

В этом случае намагниченность отлична от нуля только во внешнем поле $H^z \neq 0, \sigma \sim h$. В случае температур $T \gg T_C$ первый член разложения в уравнении (53) имеет стандартный вид:

$$\frac{1}{\sigma} \approx \frac{1}{N}\sum_q \coth\frac{h}{2\,\theta}; \qquad \sigma \approx \tanh\frac{h}{2\,\theta}.$$

Таким образом, приближении Тябликова позволяет дать удовлетворительную интерполяционную формулу для намагниченности во всем интервале температур.

4 Сегетоэлектричество

Рассмотрим теперь в рамках метода двухвременных температурных функций Грина равновесные свойства сенетоэлектрика типа KDP. Такие сегнетоэлектрики являются типичными представителями сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок. Сегнетоэлектрические свойства таких сред связаны с расположением протонов (или атомов дейтерия) в двухминимумном потенциале водородной связи, созданном всеми остальными ионами кристалла [21]. Протон может двигаться между двумя равновесными положениями в потенциале водородной связи. Основное состояние протона в каждой двухминимумной яме дважды вырождено. За счет квантовомеханического туннелирования основной уровень расщепляется на два подуровня. Если пренебречь возбужденными колебательными состояниями, мы можем при описании свободного протона ограничиться рассмотрением двухуровневой системы. При описании двухуровневых систем наиболее удобен квазиспиновый формализм. В терминах квазиспина или матриц Паули мы можем записать не только энергию свободных протонов, но и обменную энергию взаимодействия протонов, принадлежащих разным водородным связям. В этом случае гамильтониан сегнетоэлектрика аналогичен гамильтониану системы двухуровневых атомов с прямым диполь-дипольным взаимодействием. В квазиспиновом представлении гамильтониан такой системы будет иметь вид

$$H = -\hbar\Omega \sum_f S_f^x - \frac{1}{2}\sum_{f\,f'} J(f,f')\, S_f^z S_{f'}^z.$$

Здесь Ω — частота расщепления основного состояния протона в двухминимумном потенциале водородной связи (интеграл туннелирования), $J(f,f')$ — параметр прямого квазиспинового взаимодействия. Вводя, как и в предыдущем разделе, квазиспиновые операторы $S^{\pm} = S^x \pm \imath S^y$, рассмотрим для них коммутаторные функции Грина вида

$$\langle\langle S_g^+; S_f^- \rangle\rangle, \langle\langle S_g^-; S_f^- \rangle\rangle, \langle\langle S_g^z; S_f^- \rangle\rangle.$$

Для фурье-образов введенных функций Грина получаем систему алгебраических уравнений вида

$$\begin{gathered}
\omega\langle\langle S_g^+|S_f^-\rangle\rangle = \frac{\langle 2S_f^- S_g^+ + \delta_{fg}(1 - 2S_f^- S_g^+)\rangle}{2\pi} - \Omega\,\langle\langle S_g^z|S_f^-\rangle\rangle + \\
+\frac{1}{2}\sum_m J_{gm}\,\langle\langle S_g^+ S_m{}^z|S_f^-\rangle\rangle + \frac{1}{2}\sum_l J_{lg}\,\langle\langle S_l^z S_g^+|S_f^-\rangle\rangle, \\
\omega\langle\langle S_g^-|S_f^-\rangle\rangle = \frac{2\langle S_f^- S_g^-\rangle}{2\pi} + \Omega\,\langle\langle S_g^z|S_f^-\rangle\rangle - \\
-\frac{1}{2}\sum_m J_{gm}\,\langle\langle S_g^- S_m{}^z|S_f^-\rangle\rangle - \frac{1}{2}\sum_l J_{lg}\,\langle\langle S_l^z S_g^-|S_f^-\rangle\rangle, \\
\omega\,\langle\langle S_g^z|S_f^-\rangle\rangle = \frac{(1-\delta_{fg})\langle S_f^- S_g^z\rangle}{2\pi} - \Omega/2\,\langle\langle S_g^+|S_f^-\rangle\rangle + \Omega/2\,\langle\langle S_g^-|S_f^-\rangle\rangle.
\end{gathered} \tag{57}$$

Записывая уравнения для трехчастичных функций Грина, входящих в правые части уравнений (57), мы можем получить бесконечную цепочку зацепленных уравнений. Воспользуемся вначале как и в предыдущем случае для расцепления трехчастичных функций Грина расцеплением Тябликова

$$\begin{gathered}
\langle\langle S_g^{\pm} S_m^z|S_f^-\rangle\rangle = \langle S_m^z\rangle\,\langle\langle S_g^{\pm}|S_f^-\rangle\rangle, \\
\langle\langle S_l^z S_g^{\pm}|S_f^-\rangle\rangle = \langle S_l^z\rangle\,\langle\langle S_g^{\pm}|S_f^-\rangle\rangle.
\end{gathered} \tag{58}$$

Введем обозначения

$$x = \langle S^x \rangle = \langle S^{\pm} \rangle, \;\; n = \langle S^z \rangle, \;\; J_0 = \sum_j J_{ij}.$$

Для случая $f = g$ уравнения (57) с учетом расцепления (58) примут вид

$$\begin{pmatrix} \omega - J_0\, n & 0 & \Omega \\ 0 & \omega + J_0\, n & -\Omega \\ \Omega/2 & -\Omega/2 & \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\langle S_f^+ | S_f^- \rangle\rangle \\ \langle\langle S_f^- | S_f^- \rangle\rangle \\ \langle\langle S_f^z | S_f^- \rangle\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\pi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (59).$$

Секулярный детерминант для рассматриваемой системы уравнений имеет вид

$$\Delta = \omega(\omega^2 - \omega_p^2),$$

где

$$\omega_p = [(J_0\, n)^2 + (\Omega)^2]^{1/2}.$$

Полюса функций Грина, равные 0 и ω_p, определяют спектр элементарных возбуждений кристалла. Для фурье-образов функций Грина из (59) получаем

$$\langle\langle S_f^+ | S_f^- \rangle\rangle = (1/2\pi\, \Delta)[\omega(\omega + J_0\, n) - \Omega^2/2]$$

и

$$\langle\langle S_f^z | S_f^- \rangle\rangle = -(1/\pi\, \Delta)\Omega(\omega + J_0\, n).$$

Соответственно для корреляционных функции $\langle S^- S^+ \rangle$ и $\langle S^- S^z \rangle$ имеем

$$\langle S^- S^+ \rangle = 1/2 - n = 1/2 + \frac{J_0\, n\,(1 - e^{\beta\omega_p}}{2\omega_p\,(1 + e^{\beta\omega_p})},$$

$$\langle S^- S^z \rangle = 1/2\langle S^- \rangle = 1/2\langle S^x \rangle = \frac{\Omega}{\omega_p}\,\mathrm{th}\left(\frac{\beta\,\omega_p}{2}\right)$$

или

$$n = \frac{J_0}{2\omega_p}\,\mathrm{th}\left(\frac{\beta\,\omega_p}{2}\right), \qquad (60)$$

$$\langle S^x \rangle = \frac{\Omega}{2\omega_p} th\left(\frac{\beta\,\omega_p}{2}\right). \qquad (61)$$

Результаты (60) и (61) идентичны тем, что получаются в обычном приближении среднего поля [21].

В параэлектрической фазе, где равновесные положения в двухминимумном потенциале водородной связи заняты с равной вероятностью $\langle S^z \rangle = 0$.

В этом случае решением уравнений (59), минимизирующими свободную энергию системы, являются

$$\langle S^z \rangle = 0, \;\; \langle S^x \rangle = 1/2\,\mathrm{th}(1/2\beta\Omega).$$

Ниже температуры перехода T_c уравнение (60), которое можно переписать в виде

$$2\omega_p = J_0\,\mathrm{th}\left(\frac{\beta\omega_p}{2}\right),$$

имеет ненулевое решение для спонтанной поляризации $P = 2N\mu\langle S^z\rangle$. Здесь $\langle S^z\rangle = \langle S^z_f\rangle$, μ – величина электрического дипольного момента и N – число водородных связей в кристалле.

Это решение минимизирует свободную энергию ниже T_c. Последняя определяется выражением

$$\frac{2\Omega}{J_0} = \mathrm{th}\left(\frac{\beta_c\omega_p}{2}\right), \quad \beta_c = \frac{1}{kT_c}.$$

Наиболее существенным недостатком использованного приближения является отсутствие мягкой псевдоспиновой моды в спектре элементарных возбуждений кристалла, т.к. вблизи температуры Кюри T_c для продольных возбуждений, соответствующих ω_p должно иметь место условие $\omega(\vec{q} \to 0) = 0$.

Воспользуемся для рассматриваемой модели также более сложным расцеплением симметричного вида

$$\langle\langle S^z_m S^{\pm}_g | S^-_f \rangle\rangle = \langle S^z_m\rangle\,\langle\langle S^{\pm}_g | S^-_f\rangle\rangle + \langle S^{\pm}_g\rangle\,\langle\langle S^z_m | S^-_f\rangle\rangle. \tag{62}$$

Введем обозначения

$$\begin{gathered} u_{fg} = \langle\langle S^+_g | S^-_f\rangle\rangle, v_{fg} = \langle\langle S^-_g | S^-_f\rangle\rangle, w_{fg} = \langle\langle S^z_g | S^-_f\rangle\rangle, \\ \lambda_{fg} = \langle S^-_f S^+_g\rangle + (1/2)\delta_{fg}(1 - 2\langle S^-_f S^+_g\rangle), \\ \mu_{fg} = \langle S^-_f S^-_g\rangle, \nu_{fg} = \langle S^-_f S^z_g\rangle - \delta_{fg}\langle S^-_f S^z_g\rangle. \end{gathered} \tag{63}$$

С использованием приближения (63) и обозначений (62), уравнения (57) принимают вид

$$\omega\, u_{fg} = \frac{\lambda_{fg}}{\pi} - \Omega\, w_{fg} + J_0\, n\, u_{fg} + \sum_m x\, J_{mg}\, w_{mf},$$

$$\omega\, v_{fg} = \frac{\mu_{fg}}{\pi} + \Omega\, w_{fg} - J_0\, n\, v_{fg} - \sum_m x\, J_{mg}\, w_{mf}$$

$$\omega\, w_{fg} = \frac{\nu_{fg}}{\pi} - \Omega/2\, u_{fg} + \Omega/2\, v_{fg}.$$

Учтем, что в силу трансляционной симметрии кристалла все функции, зависящие от двух каких-либо узлов, в действительности зависят лишь от расстояния между ними. Тогда для каждой из таких величин мы можем ввести фурье-разложения по векторам обратного пространства (волновым векторам $\vec{q}$) вида:

$$A_{fg} = \sum_{\vec{q}} A(\vec{q}) e^{-\imath\vec{q}(\vec{f}-\vec{g})},$$

где фурье-образ разложения есть

$$A_{\vec{q}} = \sum_{g} A_{fg} e^{\imath\vec{q}(\vec{f}-\vec{g})}.$$

Тогда для фурье-образов функций Грина (62), получаем

$$\begin{pmatrix} \omega - J_0\, n & 0 & \Omega - x\, J(\vec{q}) \\ 0 & \omega + J_0\, n & -\Omega + x\, J(\vec{q}) \\ \Omega/2 & -\Omega/2 & \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\vec{q}) \\ v(\vec{q}) \\ w(\vec{q}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\pi} \begin{pmatrix} \lambda(\vec{q}) \\ \mu(\vec{q}) \\ \nu(\vec{q}) \end{pmatrix} \qquad (64).$$

Секулярный детерминант для системы уравнений (64) есть

$$\Delta = \omega[\omega^2 - \omega_1^2(\vec{q})],$$

где

$$\omega_1^2(\vec{q}) = (J_0\, n)^2 + \Omega\, [\Omega - x\, J(\vec{q})].$$

Полюса функций Грина $\omega = 0$ и $\omega = \pm\omega(\vec{q})$ как обычно определяют энергии коллективных возбуждений (мод) в кристалле. Из полученных формул следует, что $x \to (\Omega/J_0)$, если $T \to T_c$. Тогда в рассматриваемом приближении частота продольных элементарных возбуждений $\omega(\vec{q} \to 0) \to 0$, если $T \to T_c$. Таким образом симметричное расцепление предсказывает наблюдаемое экспериментально смягчение коллективной моды протонного движения.

Для симметричного расцепления уравнения для средних значений наблюдаемых принимают вид

$$\frac{1}{2} - n = \frac{1}{N}\sum_{q} \lambda(\vec{q}) - \frac{1}{N}\sum_{q} \frac{J_0\, n\, \lambda(\vec{q}) - [\Omega - x\, J(\vec{q})]\nu(\vec{q})}{\omega_1(\vec{q})} \operatorname{th}\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right), \qquad (65)$$

$$x = \frac{1}{N}\sum_{q} \nu(\vec{q}) + \frac{1}{N}\sum_{q} \frac{\Omega[\lambda(\vec{q}) - \mu(\vec{q})]}{2\omega_1(\vec{q})} \operatorname{th}\left(\frac{\beta\omega_1}{2}\right). \qquad (66)$$

Уравнения (65) и (66) могут быть решены только численными методами.

5 Модель Боголюбова

Для исследования основного и наиболее низколежащих возбужденных состояний слабо неидеального бозе-газа, например жидкого гелия He^4, можно использовать гамильтониан вида [22]

$$H = \sum_{\vec{k}} \varepsilon a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} N_0^2 V_0 + N_0 V_0 \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{k}} + N_0 \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{k}} +$$

$$+\frac{1}{2} \sum_{a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{k}}} V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}} a_{\vec{-k}} + a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{-k}}^{+}) + \text{члены более высокого порядка.} \qquad (67)$$

Здесь $N_0 = a_0^{+} a_0$ ($\vec{k} = 0$ соответствует основному состоянию системы частиц) и при суммировании всюду, кроме первого слагаемого, исключается член с $\vec{k} = 0$. Члены в правой части гамильтониана (67) можно интерпретировать (перемещаясь слева направо) следующим образом:

а. Кинетическая энергия.

б. Взаимодействия в основном состоянии $a_0^{+} a_0^{+} a_0 a_0$.

в. Безобменные процессы, не изменяющие числа частиц в основном и возбужденном состояниях: $a_0^{+} a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{k}} a_0$ и $a_{\vec{k}}^{+} a_0^{+} a_0 a_{\vec{k}}$

г. Обмен возбужденной частицы с одной частицей в основном состоянии: $a_{\vec{k}}^{+} a_0^{+} a_{\vec{k}} a_0$ и $a_0^{+} a_{\vec{k}}^{+} a_0 a_{\vec{k}}$.

д. Возбуждение двух частиц при уничтожении пары частиц в основном состоянии или уничтожение пары частиц в возбужденном состоянии при появлении двух частиц в основном состоянии: $a_0^{+} a_0^{+} a_{\vec{k}} a_{\vec{-k}}$ и $a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{-k}}^{+} a_0 a_0$.

Такая модель может быть использована для качественного описания жидкого He^4, так как в жидком He^4 потенциал взаимодествия нельзя считать очень слабым. На основании результатов нейтронно-дифракционных исследований можно предположить, что в основном состоянии менее 0,1 всех атомов находятся в основном состоянии, т.е. обладают нулевым испульсом [22].

Члены, содержащие три одночастичных оператора в основном состоянии, исключаются в гамильтониане (67) в силу закона сохранения импульса. Будем считать ожидаемое значение величины $N_0 + \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{k}}$ числом N частиц системы. Соберем соответствующие члены и перепишем (67) в виде

$$H = \frac{1}{2}N_0^2 V_0 + \sum_{\vec{k}} (\varepsilon + NV_{\vec{k}}) a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}} V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+). \qquad (68)$$

Гамильтониан (68) допускает точное аналитическое решение. Оно обычно строится с помощью канонического преобразования Боголюбова исходных операторов к новым и призвано привести (68) к диагональному виду. Мы рассмотрим решение данной модели в рамках метода двухвременных температурных функций. Введем коммутаторные запаздывающие функции Грина вида

$$\langle\langle a_{\vec{k}}(t); a_{\vec{k}}^+(t')\rangle\rangle, \quad \langle\langle a_{\vec{k}}(t); a_{-\vec{k}}^+(t')\rangle\rangle.$$

Для фурье-образов введенных функций Грина получаем

$$\omega\langle\langle a_{\vec{k}}|a_{\vec{k}}^+\rangle\rangle = 1 - \omega_1\langle\langle a_{\vec{k}}|a_{-\vec{k}}\rangle\rangle - \omega_0\langle\langle a_{\vec{k}}|a_{\vec{k}}^+\rangle\rangle,$$

$$\omega\langle\langle a_{\vec{k}}|a_{-\vec{k}}\rangle\rangle = \omega_0\langle\langle a_{\vec{k}}|a_{-\vec{k}}\rangle\rangle + \omega_1\langle\langle a_{\vec{k}}|a_{\vec{k}}^+\rangle\rangle$$

или

$$\begin{pmatrix} \omega + \omega_0 & \omega_1 \\ -\omega_1 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\langle a_{\vec{k}}|a_{\vec{k}}^+\rangle\rangle \\ \langle\langle a_{\vec{k}}|a_{-\vec{k}}\rangle\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

где введены обозначения

$$\omega_0 = \varepsilon_{\vec{k}} + NV_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} + \omega_1, \quad \varepsilon_{-\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}}, \quad V_{-\vec{k}} = V_{\vec{k}}, \quad V_{\vec{k}}^* = V_{\vec{k}}.$$

Секулярный детерминант полученногй системы уравнений имеет вид

$$\Delta = \omega^2 - \omega_0^2 + \omega_1^2.$$

Тогда спектр элементарных возбуждений в неидеальном бозе-газе имеет вид

$$\omega_{\vec{k}} = [\omega_0^2 - \omega_1^2]^{1/2}.$$

Фурье-образы введенных функций Грина имеют вид

$$\langle\langle a_{\vec{k}}|a_{\vec{k}}^+\rangle\rangle = \frac{\omega - \omega_0}{\omega^2 - \omega_{\vec{k}}^2}, \quad \langle\langle a_{\vec{k}}|a_{-\vec{k}}^+\rangle\rangle = \frac{\omega_1}{\omega^2 - \omega_{\vec{k}}^2}.$$

Тогда среднее число возбуждений $n_{\vec{k}} = \langle a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}\rangle$ есть

$$\langle n_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{2}\left[\frac{\omega_0}{\omega_{\vec{k}}}\,\mathrm{cth}\left(\frac{1}{2}\beta\omega_{\vec{k}}\right) - 1\right]. \qquad (69)$$

Общая зависимость числа частиц конденсата от температуры получается из (69) и выглядит как

$$N_0 = N - \sum_{\vec{k}\neq 0} \langle n_{\vec{k}} \rangle$$

или

$$\frac{N_0}{N} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\neq 0} \frac{\omega_0}{\omega_{\vec{k}}} \operatorname{cth}\left(\frac{1}{2N}\beta\omega_{\vec{k}}\right).$$

Для случая идеального бозе-газа эта формула дает

$$\frac{N_0}{N} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}\neq 0} \operatorname{cth}\left(\frac{1}{2}\beta\varepsilon_{\vec{k}}\right). \tag{70}$$

Критическая температура идеального-бозе газа определяется из условия того, чтобы ниже этой температуры левая часть (70) оказалась конечной величиной:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\neq 0} \operatorname{cth}\left(\frac{1}{2}\beta\varepsilon_{\vec{k}}\right) = 3.$$

6 Спонтанное излучение

Рассмотрим систему N двухуровневых атомов, взаимодействующих с равновесным квантовым электромагнитным полем [18]. Для простоты рассмотрим случай, когда размеры системы гораздо меньше длины волны излучения (точечная модель Дикке). Для описания такой системы мы можем использовать гамильтониан Дикке

$$H = H_A + H_F + H_{AF}, \tag{71}$$

где

$$H_A = \sum_f \hbar\Omega R_f^z$$

– гамильтониан системы свободных двухуровневых атомов,

$$H_F = \sum_k \hbar\omega_k a_k^+ a_k$$

– гамильтониан свободного равновесного электромагнитного поля,

$$H_{AF} = \sum_f \sum_k \hbar\, g_k \left(R_f^+\, a_k + a_k^+ R_f^-\right)$$

– гамильтониан взаимодействия между двухуровневыми атомами и квантовым полем.

Здесь индекс f нумерует излучатели в образце, Ω – частота перехода в двухуровневом атоме, R_f^z – оператор инверсии населенности в f-ом излучателе, $R_f^{\pm}$ – операторы, описывающие переходы в f-ом двухуровневом излучателе и удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[R_f^{\pm}, R_{f'}^z] = \mp R_f^{\pm}\,\delta_{ff'}, \qquad [R_f^{+}, R_{f'}^{-}] = 2\,R_f^z\,\delta_{ff'},$$

$a_k^+(a_k)$ – оператор рождения (уничтожения) фотона с частотой ω_k, волновым вектором $\vec{k}$ и поляризацией $\vec{e}_\lambda$, g_k – константа диполь-фотонного взаимодействия

$$g_k = \sqrt{\frac{2\,\pi\,\rho\,\hbar}{N\,\omega_k}}\,\Omega\,\langle +|\vec{d}\,\vec{e}_\lambda|-\rangle,$$

где $\vec{d}$ – оператор дипольного перехода в двухуровневом атоме, $|\pm\rangle$ – волновые функции возбужденного и девозбужденного состояний в двухуровневом атоме, ρ – плотность числа излучателей в системе.

Для вычисления среднего числа заполнения $\langle n_f\rangle = \langle R_f^+\,R_f^-\rangle$ для возбужденного состояния $|+\rangle_f$ двухуровневого атома f введем запаздывающую антикоммутаторную двухвременную функцию Грина (как и прежде будем считать $\hbar \equiv 1$)

$$G(t-t') = \langle\langle R_f^-(t); R_f^+(t')\rangle\rangle^r = -i\,\theta(t-t')\,\langle [R_f^-(t), R_f^+(t)]_\eta\rangle, \qquad (72)$$

где $\eta = -1$. Усреднение в (72) производится по равновесному каноническому ансамблю Гибба

$$\rho = Q^{-1}\,e^{-H/\theta}.$$

Уравнение движения для функции Грина (72) имеет вид

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}G(t-t') = \delta(t-t')\,\langle [R_f^-, R_f^+]_{\eta=-1} + \Omega\,G(t-t') -$$

$$-2\sum_k g_k\,\langle\langle a_k(t)\,R_f^z(t); R_f^+(t')\rangle\rangle, \qquad (73)$$

где $\langle [R_f^-, R_f^+]_{\eta=-1}\rangle = 1$.

Введем обозначение для антикоммутаторной запаздывающей функции Грина более высокого порядка в правой части (73)

$$G_k(t-t') = \langle\langle a_k(t)\,R_f^z(t); R_f^+(t')\rangle\rangle$$

и составим для нее уравнение движения

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}G_k(t-t') = \delta(t-t')\,\langle[a_k\,R^z_f, R^+_f]_{\eta=-1}\rangle + \omega_k\,G_k(t-t') -$$

$$-\frac{1}{2}\,g_k\,G(t-t') + \sum_{k'} g_{k'}\,\langle\langle a_{k'}(t)\,a_k(t)\,R^+_f(t); R^+_f(t')\rangle\rangle -$$

$$-\sum_{k'} g_{k'}\,\langle\langle a^+_{k'}(t)\,a_k(t)\,R^-_f(t); R^+_f(t')\rangle\rangle +$$

$$+\sum_{f'(f\neq f')} g_k\,\langle\langle R^z_f(t)\,R^-_{f'}(t); R^+_f(t')\rangle\rangle. \tag{74}$$

Заметим, что среднее $\langle[a_k\,R^z_f, R^+_f]_{\eta=-1}\rangle$ в правой части (74) равно нулю.

В изучаемой системе могут быть реализованы два физически различных состояния. Если плотность излучателей в системе мала, то двухуровневые атомы излучают независимо. В этом случае последним слагаемым в уравнении (74), которое описывает взаимодействие между излучателями через общее поле излучения, можно пренебречь. Однако возможна и другая ситуация, когда взаимодействие между атомами через общее поле излучения велико. В этом случае система находится в коллективном состоянии, когда вероятности излучения атомами фотонов значительно возрастают. Такое состояние можно назвать равновесным сверхизлучением. В настоящем пособии мы ограничимся рассмотрением спонтанного излучения независимых атомов. Перейдем в уравнениях (73) и (74) к фурье-образам

$$\omega\,G(\omega) = 1 + \Omega\,G(\omega) - 2\sum_k g_k\,G_k(\omega), \tag{75}$$

$$\omega\,G_k(\omega) = \omega_k\,G_k(\omega) - \frac{1}{2}\,g_k\,G(\omega) +$$

$$+\sum_{k'} g_{k'}\,\langle\langle a_{k'}\,a_k\,R^+_f|R^+_f\rangle\rangle_\omega - \sum_{k'} g_{k'}\,\langle\langle a^+_{k'}\,a_k\,R^-_f|R^+_f\rangle\rangle_\omega.$$

Используя очевидные расцепления для функций Грина

$$\langle\langle a^+_{k'}\,a_k\,R^-_f|R^+_f\rangle\rangle_\omega \approx \langle a^+_{k'}\,a_k\rangle\langle\langle R^-_f|R^+_f\rangle\rangle_\omega = \nu_k\,\langle\langle R^-_f|R^+_f\rangle\rangle_\omega\,\delta_{k\,k'},$$

$$\langle\langle a_{k'}\,a_k\,R^+_f|R^+_f\rangle\rangle_\omega \approx \langle a_{k'}\,a_k\rangle\langle\langle R^+_f|R^+_f\rangle\rangle_\omega = 0,$$

где $\nu_k = \langle a^+_k\,a_k\rangle$ - среднее число фотонов в состоянии k, уравнение для $G_k(\omega)$ запишем в виде

$$(\omega-\omega_k)\,G_k(\omega) = -\frac{1}{2}\,(1+2\,\nu_k)\,g_k\,G(\omega). \tag{76}$$

Решая уравнения (75) и (76) совместно, получаем для фурье-образа исходной функции Грина $G(\omega)$ выражение

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - \Omega - M(\omega)},$$

где массовый оператор

$$M(\omega) = \sum_k g_k^2 \, \frac{1 + 2\,\nu_k}{\omega - \omega_k}.$$

Введем стандартным образом действительную и мнимую части массового оператора

$$M(\omega \pm i\,\varepsilon) = \Delta(\omega) \mp i\,\Gamma(\omega),$$

где

$$\Gamma(\omega) = \pi \sum_k g_k^2 \,(1 + 2\,\nu_k)\,\delta(\omega - \omega_k).$$

Считая затухание малым мы можем вычислить вероятности испускания и поглощения фотона излучателем. В частности для вакуумного состояния электромагнитного поля ($T = 0$) мы можем вычислить вероятность спонтанного излучения по формуле

$$\gamma = 2\,\Gamma(\Omega) = 2\,\pi \sum_k g_k^2 \,(1 + 2\,\nu_k)\,\delta(\omega - \Omega) \quad (\nu_k = 0). \tag{77}$$

Переходя в (77) известным образом (см., например, [19]) от суммирования к интегрированию по k получаем для вероятности спонтанного излучения одиночного атома стандартное выражение

$$\gamma = \frac{1}{\tau} = \frac{\hbar\, c^3}{4\, d^3\, \Omega^3},$$

(с учетом $\hbar$), где d – модуль вектора дипольного момента двухуровневого атома.

Таким образом, метод двухвременных температурных функций Грина позволяет вычислять достаточно просто и последовательно средние значения макроскопических параметров для равновесных систем различной физической природы. Теперь перейдем к изучению свойств неравновесных состояний в рамках метода двухвременных температурных функций Грина.

7 Линейная реакция системы на внешние механические возмущения

В статистической термодинамике неравновесных процессов механическими возмущениями называются возмущения, представляющие действие внешних полей, которые можно полностью описать добавлением к гамильтониану соответствующей энергии взаимодействия системы с полем. Возмущения, которые не допускают такого представления, называются термическими. Причиной таких возмущений может быть совершаемая над системой работа через изменение ее объема, или взаимодействие с другими ансамблями (обладающими другой температурой или химическим потенциалом). В этом случае изменение внешних параметров влияет на функцию распределения или статистический оператор не прямым, а косвенным образом; оно создает статистически неравновесное состояние, которое затем стремится к равновесному, если нет препятствующих этому воздействий. Лишь в случае, когда возмущение вызвано внешними полями, оно непосредственно влияет на функцию распределения, с чем и связана относительная простота изучения механических возмущений.

Рассмотрим реакцию квантовомеханической системы с гамильтонианом H, не зависящим от времени, на включение внешнего механического возмущения H_t^1. Будем считать, что возмущение включается адиабатически при $t = -\infty$. Для описания адиабатического включения взаимодействия воспользуемся следующим приемом. Добавим в спектральное разложение оператора возмущения множитель $e^{\varepsilon t}$, где ε малое положительное число. Понятно, что при $\varepsilon \to 0$ указанный множитель обращается в нуль для $t = -\infty$. Далее мы должны провести вычисления макроскопических параметров и уже в конечных формулах перейти к пределу $\varepsilon \to 0$.

Таким образом, для адиабатически включаемого взаимодействия мы имеем

$$H_t^1 = \frac{e^{\varepsilon t}}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} H_\omega^1, \quad (\varepsilon \to 0, \varepsilon > 0). \tag{78}$$

Вычислим среднее значение некоторой динамической переменной $\mathcal{O}$ при действии возмущения (78). По определению среднего

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle = Sp\{\mathcal{O}\rho(t)\}, \tag{79}$$

где статистический оператор $\rho(t)$ удовлетворяет квантовому уравнению Лиувилля

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [H + H_t^1, \rho(t)] \tag{80}$$

и начальному условию

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_0 = Q^{-1}(T, V)e^{-H/kT}, \tag{81}$$

которое означает, что при $t = -\infty$ система находилась в состоянии статистического равновесия и описывалась каноническим ансамблем Гиббса (для упрощения записей $\hbar \equiv 1$). Для начального условия можно применить также и большой канонический ансамбль Гиббса

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_0 = Q^{-1}(T, V, N)e^{-(H-\mu N)}/kT.$$

Считая возмущение H_t^1 малым, решение уравнения (80) будем искать в виде

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho_t^1, \tag{82}$$

с начальным условием

$$\rho_t^1|_{t=-\infty} = 0.$$

Подставляя представление (82) в уравнение Лиувилля (80), получим

$$i\frac{\partial}{\partial t}(\rho_0 + \rho_t^1) = [H, \rho_0] + [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0] + [H_t^1, \rho_t^1]. \tag{83}$$

Учитывая, что невозмущенный гамильтониан H коммутирует с равновесным статистическим оператором ρ_0 и равновесный статистический оператор ρ_0 не зависит от времени, мы можем переписать уравнение (83) в виде

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 = [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0] + [H_t^1, \rho_t^1]. \tag{84}$$

Ограничим себя исследованием линейной реакции системы на малые механические возмущения. Тогда мы можем пренебречь последним слагаемым в уравнении (84), имеющим второй порядок малости по возмущению. В результате получаем:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 = [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0]. \tag{85}$$

Для того, чтобы избавиться от первого слагаемого в правой части уравнения (85), перейдем к представлению взаимодействия для ρ_t^1:

$$\rho_t^1(t) = e^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt}. \tag{86}$$

Умножая (85) на мнимую единицу и дифференцируя по времени, имеем

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = -He^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt} + He^{iHt} i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 e^{-iHt} + e^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt}H,$$

или

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = [\rho_t^1(t), H] + He^{iHt}\left(i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1\right)e^{-iHt}. \tag{87}$$

Подставляя во второе слагаемое в правой части (87) выражение (85) и взаимно уничтожая члены $[H, \rho_t^1(t)]$ и $[\rho_t^1(t), H]$, получаем

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = [H_t^1(t), \rho_0], \tag{88}$$

где $H_t^1(t) = e^{iHt}H_t^1 e^{-iHt}$– оператор возмущения в представлении взаимодействия. При выводе (88) мы учли также коммутативность невозмущенного гамильтониана H и начального равновесного статистического оператора ρ_0.

С учетом начального условия $\rho_t^1(t)|_{t\to-\infty} = 0$ решение уравнения (88) имеет вид

$$\rho_t^1(t) = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[H_{t'}^1(t'), \rho_0]. \tag{89}$$

Умножая правую и левую части уравнения (89) слева на e^{-iHt}, а справа на e^{iHt}, получаем решение для статистического оператора ρ_t^1

$$\rho_t^1 = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt' e^{-iHt}[H_{t'}^1(t'), \rho_0]e^{iHt}. \tag{90}$$

Тогда среднее значение динамической переменной $\mathcal{O}$ можно записать в виде

$$\begin{gathered}\langle\mathcal{O}(t)\rangle = Sp\{\mathcal{O}\rho(t)\} = \\ = Sp\{\mathcal{O}\rho_0\} + Sp\{\mathcal{O}\rho_t^1\} = \\ = \langle\mathcal{O}\rangle - i\int\limits_{-\infty}^{t} dt' Sp\{e^{-iHt}[H_{t'}^1(t'), \rho_0]e^{iHt}\mathcal{O}\},\end{gathered} \tag{91}$$

где $\langle\mathcal{O}\rangle$ – равновесное среднее для динамической переменной $\mathcal{O}$. Проводя циклическую перестановку операторов под знаком шпура, мы можем переписать формулу (91) в следующем виде:

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\langle[\mathcal{O}(t), H_{t'}^1(t')]\rangle, \tag{92}$$

где $\langle \ldots \rangle = Sp\{\ldots \rho_0\}$ означает усреднение по равновесному статистическому оператору.

Формулу (92) можно сделать более симметричной, если использовать под знаком интеграла тета-функцию Хевисайда:

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \Theta(t-t') \langle [\mathcal{O}(t), H^1_{t'}(t')] \rangle. \tag{93}$$

Наконец, вводя запаздывающую двухвременную температурную функцию Грина:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^r = -i\Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle, \tag{94}$$

для приращения среднего значения динамической переменной $\mathcal{O}$ получаем так называемую формулу Кубо

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \langle\langle \mathcal{O}(t), H^1_{t'}(t') \rangle\rangle^r. \tag{95}$$

Физический смысл запаздывающих двухвременных функций Грина состоит в том, что они описывают реакцию системы на мгновенное δ-образное возмущение вида

$$H^1_t = B\delta(t-t'),$$

где B – не зависящий от времени оператор.

Для такого возмущения приращение среднего любой динамической величины определяется непосредственно запаздывающей функцией Грина

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle = \langle\langle \mathcal{O}(t), B(t') \rangle\rangle^r. \tag{96}$$

(отсюда и название для величин (94) по аналогии с теорией дифференциальных уравнений, где функции Грина являются решениями уравнений с δ-образными неоднородностями).

Связь между приращением средних для динамических переменных и запаздывающей функцией Грина становится особенно простой при переходе к фурье-образам соответствующих величин.

Введем фурье-разложение запаздывающей функции Грина:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^r = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iE(t-t')} \langle\langle A|B \rangle\rangle^r_E. \tag{97}$$

Подставляя разложение (97) в формулу Кубо (95), получаем

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dEdt'\langle\langle\mathcal{O}|H^1_{t'}\rangle\rangle^r_E e^{-iE(t-t')}.$$

В правой части последнего выражения воспольземся также фурье- разложением для оператора возмущения вида (78). Тогда

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega dEdt' e^{\varepsilon t'}\langle\langle\mathcal{O}|H^1_{\omega}\rangle\rangle^r_E e^{-iE(t-t')}e^{-i\omega t'}. \tag{98}$$

Используя интегральное представление для δ-функции

$$\delta(\omega - E) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i(\omega-E)t'},$$

формулу (98) можно записать в виде

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\langle\langle\mathcal{O}|H^1_{\omega}\rangle\rangle^r_{E=\omega+\imath\varepsilon} e^{-i\omega t}. \tag{99}$$

Тогда фурье-компонента приращения среднего значения динамической переменной будет непосредственно связана с фурье-компонентой запаздывающей функции Грина

$$\langle\Delta\mathcal{O}(\omega)\rangle = \langle\langle\mathcal{O}|H^1_{\omega}\rangle\rangle^r_{\omega+\imath\varepsilon}. \tag{100}$$

Часто внешнее поле можно представить в виде

$$H^1_t = -\sum_j B_j A_j(t),$$

где B_j – операторная часть внешнего поля, а $A_j(t)$ – зависящая от времени амплитуда внешнего поля. В этом случае формулу (100) можно записать в виде

$$\langle\Delta\mathcal{O}_i(\omega)\rangle = \chi_{ij}(\omega)A_j(\omega), \tag{101}$$

где $\chi_{ij}(\omega) = -\langle\langle\mathcal{O}_i|B_j\rangle\rangle^r_{\omega}$ – комплексная обобщенная восприимчивость системы. Например, если внешнее возмущение представляет собой электрическое поле, то

$$H^1_t = -\sum_{\alpha} P_{\alpha}E_{\alpha}(t).$$

Здесь P_α – проекция α оператора дипольного момента системы. Тогда средний ток представляем как:

$$\langle j_\alpha(\omega)\rangle = \sigma_{\alpha\beta}(\omega)E_\beta(\omega), \tag{102}$$

где

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\langle\langle j_\alpha | P_\beta\rangle\rangle_\omega$$

– тензор электропроводности системы.

Далее мы перейдем к рассмотрению приложений теории линейной реакции к задачам о ферромагнитном резонансе и вычислении проводимости металлов.

8 Ферромагнитный резонанс

Если на спиновую систему наложить постоянное магнитное поле $\vec{\mathcal{H}}$ и перпендикулярно к нему – переменное радиочастотное поле $\vec{h}(t)$, то при частоте переменного поля, близкой к частоте свободной прецессии спинов вокруг направления вектора $\vec{\mathcal{H}}$, резко возрастает передача энергии от поля $h(t)$ к спиновой системе. Рассмотрим это явление на основе развитой ранее теории.

Пусть спиновая система состоит из N одинаковых спинов 1/2, помещенных в узлах решетки f. Для того, чтобы не учитывать энергию размагничивания, будем считать образец неограниченным. Постоянное подмагничивающее поле будем считать направленным по оси z.

Ограничимся рассмотрением случая, когда длина волны радиочастотного поля много больше размеров образца, и поле можно считать однородным. Кроме того положим, что радиочастотное поле $\vec{h}$ перпендикулярно подмагничивающему полю и лежит, следовательно, в плоскости (x, y). Тогда оператор взаимодействия спиновой системы с переменным полем запишется в виде

$$H_t^1 = -\mu\sum_\omega e^{-i\omega t}\vec{h}_\omega\vec{S}, \tag{103}$$

где $\vec{S} = \sum\limits_f \vec{S}_f$ – полный спин системы, μ – магнитный момент спина.

Считая возмущение малым, мы можем согласно формуле (101) представить приращение Фурье-образа среднего значения вектора намагниченности при адиабатном включении взаимодействия

$$\langle \Delta M^\alpha(\omega)\rangle = \mu\Delta\langle S^\alpha(\omega)\rangle = \sum_\beta \chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta,$$

где магнитная восприимчивость

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = -2\pi\mu^2\langle\langle S^\alpha | S^\beta\rangle\rangle_\omega^r.$$

Здесь мы учли, что Фурье-образ оператора возмущения

$$H_\omega^1 = 2\pi\sum_\beta S^\beta h_\omega^\beta.$$

Из свойств симметрии функций Грина следует, что

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \chi_{\alpha\beta}^*(-\omega). \tag{104}$$

Соответственно, приращение временного среднего имеет вид

$$\langle \Delta M^\alpha(t)\rangle = \sum_{\beta\omega} e^{-i\omega t}\chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta. \tag{105}$$

Для оператора возмущения H_t^1 используется также форма записи

$$H_t^1 = -\mu\sum_{\omega>0}\left(e^{-i\omega t}\vec{h}_\omega\vec{S} + e^{i\omega t}\vec{h}_{-\omega}^*\vec{S}\right), \tag{106}$$

где $h_{-\omega}^\alpha = h_\omega^{*\alpha}$. Тогда взамен формулы (105) имеем

$$\langle \Delta M^\alpha(t)\rangle = \sum_{\beta,\omega>0}\left(e^{-i\omega t}\chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta + e^{i\omega t}\chi_{\alpha\beta}(-\omega) h_\omega^{\beta *}\right). \tag{107}$$

Так как восприимчивость χ выражается линейно через функции Грина, то их полюсы будут определять поведение χ в области резонанса. Явный вид χ определяется явным видом гамильтониана взаимодействия.

При описании ферромагнетиков удобно ввести операторы

$$S^\pm = S^x \pm iS^y$$

(свойства этих операторов описаны в разделе 3) и функции Грина

$$G_{11}(\omega) = \langle\langle S^+ | S^+\rangle\rangle_\omega^r, \quad G_{12}(\omega) = \langle\langle S^+ | S^-\rangle\rangle_\omega^r,$$

$$G_{21}(\omega) = \langle\langle S^- | S^+\rangle\rangle_\omega^r, \quad G_{11}(\omega) = \langle\langle S^- | S^-\rangle\rangle_\omega^r.$$

Тогда компоненты тензора χ будут выражаться через функции $G_{11}, G_{12}, G_{21}, G_{22}$:

$$\chi_{xx}(\omega) = -\frac{\pi\mu^2}{2}(G_{11}(\omega) + G_{22}(\omega) + G_{12}(\omega) + G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{xy}(\omega) = \frac{\pi\mu^2 i}{2}(G_{11}(\omega) - G_{22}(\omega) - G_{12}(\omega) + G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{xz}(\omega) = \chi_{zx}(\omega) = \chi_{zy}(\omega) = 0,$$

$$\chi_{yx}(\omega) = \frac{\pi\mu^2 i}{2}(G_{11}(\omega) - G_{22}(\omega) + G_{12}(\omega) - G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{yy}(\omega) = \frac{\pi\mu^2}{2}(G_{11}(\omega) + G_{22}(\omega) - G_{12}(\omega) - G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{zz} = \chi_{st},$$

где χ_{st} – статическая восприимчивость. Энергия, поглощенная спиновой системой из радиочастотного поля за единицу времени, численно равна работе, совершенной полем за это же время. Определим последнюю следующим образом:

$$\frac{d}{dt}A(t) = \sum_{\alpha} h^{\alpha}(t)\frac{d}{dt}\Delta\langle M^{\alpha}(t)\rangle =$$

$$= \sum_{\alpha\beta,\omega\omega'>0} \omega' \left\{h^{\alpha}_{\omega}e^{-i\omega t} + h^{\alpha *}_{\omega}e^{i\omega t}\right\} \left\{\chi_{\alpha\beta}(\omega)h^{\beta}_{\omega'}e^{-i\omega' t} - \chi_{\alpha\beta}(-\omega')h^{\beta *}_{\omega'}e^{i\omega' t}\right\}. \quad (108)$$

Средняя мощность, поглощаемая системой, равна

$$W = -\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int\limits_0^T \frac{d}{dt}A(t)dt.$$

Используя (108), получаем следующее выражение:

$$W = -i\sum_{\alpha\beta,\omega>0} \omega \left\{\chi^{*}_{\alpha\beta}(\omega)h^{\alpha}_{\omega}h^{\beta^*}_{\omega} - \chi_{\alpha\beta}(\omega)h^{\alpha^*}_{\omega}h^{\beta}_{\omega}\right\}. \quad (109)$$

В случае линейно поляризованного поля $h^{\alpha}_{\omega} = h^{\alpha *}_{\omega}$ и формула (109) принимает вид

$$W = -\sum_{\alpha\beta,\omega>0} 2\omega Im\chi_{\alpha\beta}(\omega)h^{\alpha}_{\omega}h^{\beta}_{\omega}. \quad (110)$$

Из (110) следует, что поглощение энергии спиновой системой определяется в случае линейно поляризованного поля мнимой частью тензора восприимчивости. В окрестности полюсов функций Грина восприимчивость резко возрастает и поглощение имеет резонансный характер.

Предположим, что функции Грина $G_{ij}(\omega)$ в некотором приближении имеют полюса в нижней полуплоскости $\omega = \pm\omega_R - i\Gamma$ (где $\Gamma > 0$ описывает затухание тех спиновых волн, которые возбуждаются при ферромагнитном резонансе)

$$G_{ij} \sim \frac{1}{\omega \pm \omega_R + i\Gamma}.$$

В этом случае нетрудно показать, что (см., например, [7]) мощность, поглощаемая системой, имеет вид

$$W \simeq \sum_{\alpha\beta,\omega>0} \chi^0_{\alpha\beta} h^\alpha_\omega h^\beta_\omega \frac{\omega^2\omega_R\Gamma}{(\omega^2 - \omega_R^2 - \Gamma^2)^2 + (2\omega\Gamma)^2},$$

где $\chi^{(0)}_{\alpha\beta}$ - некоторые постоянные.

При приближении частоты внешнего поля к собственной частоте системы ω_R поглощение возрастает и достигает при $\omega \sim \omega_R$ максимального значения

$$W_{\max} \sim \frac{\omega_R}{\Gamma}.$$

Таким образом, введение затухания как мнимых частей функций Грина равноценно учету перераспределения энергии в системе между различными степенями свободы. В результате имеет место диссипация энергии, поглощаемой при резонансе.

Перейдем теперь к вычислению компонент тензора магнитной восприимчивости χ в рамках рассматриваемой модели изотропного неограниченного ферромагнетика. В разделе 3 для системы с гамильтонианом (40) нами была вычислена в приближении Тябликова функция Грина вида $\langle\langle S^+_f | S^-_{f'}\rangle\rangle^r_\omega$, которая оказалась равной

$$\langle\langle S^+_f | S^-_{f'}\rangle\rangle^r_\omega = \sum_{\vec{q}} \frac{\delta_{ff'}\sigma}{\omega - E(\vec{q}) + i\varepsilon} e^{i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}')}, \tag{111}$$

где $E(\vec{q}) = \omega_R + \frac{1}{2}\{J(0) - J(\vec{q})\}$ – энергия элементарных возбуждений в ферромагнитном кристалле.

Здесь $\omega_R = \mu\mathcal{H}$ – зеемановская энергия магнитного момента μ во внешнем магнитном поле $\mathcal{H}$, σ – относительная намагниченность на один узел и $J(\vec{q})$ – фурье-компонента обменного взаимодействия спинов в узлах решетки. Суммирование по волновым векторам $\vec{q}$ в формуле (111) производится по N значениям в пределах первой зоны Бриллюэна.

Тогда функция Грина G_{12} есть

$$G_{12}(\omega) = \langle\langle S^+|S^-\rangle\rangle^r_\omega = \sum_{ff'}\langle\langle S^+_f|S^-_{f'}\rangle\rangle^r_\omega =$$

$$= \frac{N\sigma}{\omega - E(\vec{q}=0) + i\varepsilon} = \frac{N\sigma}{\omega - \omega_R + i\varepsilon}.$$

Нетрудно также вычислить и остальные функции Грина. Они оказываются равными

$$G_{21}(\omega) = -\frac{N\sigma}{\omega + \omega_R + i\varepsilon}$$

и

$$G_{11}(\omega) = G_{22}(\omega) = 0.$$

Тогда легко вычислить действительные и мнимые части компонент тензора магнитной проницаемости

$$Re\chi_{xx}(\omega) = P\frac{\chi_0}{1-(\omega/\omega_R)^2}.$$

$$Im\chi_{xx}(\omega) = \frac{\pi\chi_0}{2}\omega_R\{\delta(\omega-\omega_R) - \delta(\omega+\omega_R)\},$$

$$Re\chi_{yx}(\omega) = -\frac{\pi\chi_0}{2}\omega_R\{\delta(\omega-\omega_R) + \delta(\omega+\omega_R)\},$$

$$Im\chi_{yx}(\omega) = -\frac{\omega}{\omega_R}P\frac{\chi_0}{1-(\omega/\omega_R)^2}.$$

$$\chi_{yy}(\omega) = \chi_{xx}(\omega), \quad \chi_{xy}(\omega) = -\chi_{yx}(\omega),$$

где $\chi_0 = \frac{N\sigma\mu^2}{2\omega_R}$.

В рассмотренном случае резонансная частота ω_R совпадает с частотой ларморовской прецессии спина вокруг направления постоянного поля $\mathcal{H}$. Так как ω_R – энергия элементарного возбуждения (спиновой волны) с $\vec{q}=0$, то это означает, что при резонансе (в линейном приближении) возбуждаются только такие спиновые волны. Форма линии в рассматриваемом случае имеет δ-образный вид. Если в спиновой системе учесть затухание, что можно сделать феноменологически, смещая полюсы функций Грина в комплексную плоскость: $\omega \pm \omega_R \to \omega \pm \omega_R + i\Gamma$, где Γ – величина затухания для спиновых волн с $\vec{q}=0$, мы можем получить более реалистичные формулы для компонент тензора восприимчивости [7]. Форма линии в этом случае будет лоренцевской.

9 Кинетика электронов проводимости

9.1 Общий формализм

Полный гамильтониан электрон-фононной системы с учетом эффектов экранирования электронами проводимости потенциалов ионов и рассеяния электронов на примесях выберем в виде

$$H = H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph} + H_{imp}. \tag{112}$$

Здесь

$$H = \sum_{k\lambda} \omega_{k\lambda} b^{+}_{k\lambda} b_{k\lambda}$$

– гамильтониан свободного фононного поля; $b^{+}_{k\lambda}(b_{k\lambda})$ – оператор рождения (уничтожения) фонона с частотой $\omega_{k\lambda}$ и поляризацией λ.

$$H = \sum_{p} \varepsilon_p a^{+}_p a_p$$

– гамильтониан электронов проводимости: $a^{+}_p(a_p)$ – оператор рождения (уничтожения) электрона проводимости с кинетической энергией ε_p, квазимпульсом $\vec{p}$ и спиновым числом σ $(p \equiv (\vec{p}, \sigma))$.

$$H_{el-ph} = \sum_{k\lambda} F_{k\lambda}(b^{+}_{k\lambda} + b_{k\lambda})\rho_{-k}$$

– гамильтониан электрон-фононного взаимодействия; $\rho_k = \sum\limits_p a^{+}_p a_{p+k}$ (здесь и в дальнейшем мы используем обозначения $a_{p+k} \equiv a_{\vec{p}+\vec{k},\sigma}$) – фурье-компонента плотности электронов (точнее плотность вероятности распределения электронов в металле). Матричный элемент $F_{k\lambda}$ имеет вид

$$F_{k\lambda=l} \sim ig\frac{k}{\sqrt{2\omega_k}}\frac{1}{\sqrt{V}}; \quad g \sim const.$$

Поскольку во взаимодействии с электронами принимают участие только продольные фононы, индекс продольной поляризации у матричного элемента электрон-фононного взаимодействия мы указывать не будем.

И, наконец,

$$H_{imp} = \sum_{q\neq 0} V_i(q) S(\vec{q}) \rho_{-\vec{q}}$$

–гамильтониан, описывающий взаимодействие (рассеяние) электронов с примесями; $V_i(q)$ – фурье-компонента потенциала рассеяния в примесном узле; $S(\vec{q})$ описывает распределение примесей

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N} e^{-i\vec{q}\vec{l}} C_l,$$

где $\vec{l}$ – радиус-вектор, определяющий положение узлов в решетке, N – число узлов решетки, $C_l = 0$ в узлах основной решетки и $C_l = 1$ в примесных узлах.

Как обычно при рассмотрении кристаллов конечного размера (с конечным числом узлов N) мы накладываем на систему циклические граничные условия, которые приводят, в частности, к тому, что квазиимпульс принимает дискретный набор значений.

Рассеяние электронов на фононах и примесях приводит к появлению конечного сопротивления металлов. Рассмотрим проводимость металлов в продольном электрическом поле $\vec{E}(t,\vec{r})$. Как известно, продольное электрическое поле можно описать с использованием только скалярного потенциала $\varphi(t,\vec{r})$:

$$\vec{E}(t,\vec{r}) = -\nabla\varphi(t,\vec{r}).$$

Соответственно, для фурье-образов имеем

$$\vec{E}(\vec{k},\omega) = -i\vec{k}\varphi(\vec{k},\omega).$$

Оператор возмущения возьмем в стандартном виде

$$H_t^1 = e\int e\rho(\vec{r})\varphi(t,\vec{r})d\vec{r}. \tag{113}$$

Скалярный потенциал в (113) мы можем разложить в трехмерный ряд Фурье по пространственным координатам (разложение по плоским волнам) в силу его периодичности по данным переменным и в интеграл Фурье по временной переменной

$$\varphi(t,\vec{r}) = \frac{1}{2\pi}e^{\varepsilon t}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}\frac{1}{V}\sum_k e^{i\vec{k}\vec{r}}\varphi(\vec{k},\omega). \tag{114}$$

Плотность электронного газа в (113) можно представить в виде

$$\rho(\vec{r}) = \Psi^+(\vec{r})\Psi(\vec{r}),$$

где $\Psi^+(\vec{r})(\Psi(\vec{r}))$ – оператор рождения (уничтожения) электрона в точке $\vec{r}$.

Переходя к представлению вторичного квантования по плоским волнам

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p a_p e^{i\vec{p}\vec{r}}, \qquad \Psi(\vec{r})^+ = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p a_p^+ e^{-i\vec{p}\vec{r}},$$

где V – объем системы N электронов и, учитывая разложение (113) для гамильтониана возмущения, получаем (при адиабатическом включении взаимодействия)

$$H_t^1 = \frac{e^{\varepsilon t}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{V} \sum_k \varphi(\vec{k}, \omega) e \rho_{-k},$$

где, как уже было сказано ранее, ρ_k – фурье-компонента электронной плотности

$$\rho_{\vec{k}} = \sum_k \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{k'} a_{k'}^+ a_{k'+k}.$$

Средний ток, возникающий в системе под действием внешнего возмущения, согласно формуле (102) равен

$$\langle j_\alpha(\vec{k}, \omega) \rangle = e \langle \langle j_k^\alpha | H_\omega^1 \rangle \rangle_\omega^r = \frac{e^2}{V} \langle \langle j_k^\alpha | \rho_{-k} \rangle \rangle_\omega^r \phi(\vec{k}, \omega),$$

где фурье-компонента оператора тока электронов:

$$e j_k^\alpha = \frac{e}{m} \sum_p \left(\vec{p} + \frac{\vec{k}}{2} \right)_\alpha a_p^+ a_{p+k}. \tag{115}$$

Согласно определению, продольная проводимость системы равна

$$\sigma(k, \omega) = \frac{\vec{k} \langle \vec{j}_k(k, \omega) \rangle}{\vec{k} \vec{E}(k, \omega)} = \frac{i}{k^2} \frac{\vec{k} \vec{j}_k(k, \omega)}{\varphi(k, \omega)} =$$

$$= \frac{ie^2}{k^2} \frac{1}{V} \langle \langle (\vec{k} \vec{j}_k) | \rho_{-k} \rangle \rangle_\omega^r.$$

Таким образом, для вычисления проводимости необходимо получить выражение для двухчастичной ФГ:

$$\sigma(k, \omega) = \frac{ie^2}{mk^2} \frac{1}{V} \sum_p \left(\vec{p} + \frac{\vec{k}}{2} \right) \vec{k} \langle \langle a_p^+ a_{p+k} | \rho_{-k} \rangle \rangle_\omega. \tag{116}$$

9.2 Приближение времени релаксации

Ограничимся в дальнейшем вычислением функций Грина в случае достаточно низких частот $\omega \ll \omega_0$ и больших длин волн внешнего поля $k \ll k_F$

(длинноволновое приближение), что соответствует обычной проводимости металлов. Здесь ω_0 и k_F – частота и волновой вектор для уровня Ферми.

Рассмотрим уравнение для функций Грина с гамильтонианом (112)

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\langle a_p^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle = \delta(t-t')(n_p - n_{p+k})+$$
$$+(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)\langle\langle a_p^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle+$$
$$+\langle\langle[a_p^+a_{p+k}, H_{el-ph}+H_{imp}];\rho_{-k}(t')\rangle\rangle, \tag{117}$$

где $n_p = \langle a_p^+ a_p\rangle = 1/[\exp(\varepsilon_p/k_BT)+1)]$.

В правой части уравнения (117) появились более сложные, нежели исходные функции Грина. Их мы можем представить как исходную функцию Грина, умноженную на массовый оператор. Переходя в (117) к фурье-образам, получаем

$$(\omega-\omega_{pk})G_p(k,\omega) = (n_p - n_{p+k}) + M_p(k,\omega)G_p(k,\omega),$$

или

$$G_p(k,\omega) = \frac{n_p - n_{p+k}}{\omega-\omega_{pk}-M_p(k,\omega)},$$

где $\omega_{pk} = \varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p$.

Поскольку нас интересует лишь эффект затухания функций Грина, мы можем оставить в массовом операторе лишь мнимую часть. Учитывая, что $\omega << \omega_0$ и $k << k_F$, получаем

$$ImM_p(k,\omega+i\varepsilon) \approx -i\gamma_p(k,\omega)) \approx -i\gamma_p.$$

Пользуясь также разложением

$$n_p - n_{p+k} = -\frac{\partial n_p}{\partial\varepsilon_p}\frac{\vec{k}\vec{p}}{m}; \quad \omega_{\vec{p}\vec{k}} \approx \frac{\vec{k}\vec{p}}{m} \ll \frac{p^2}{m},$$

получим

$$G_p(k,\omega) \approx -\frac{\partial n_p}{\partial\varepsilon_p}\frac{\vec{k}\vec{p}}{m}\frac{1}{\omega+i\gamma_p}.$$

В этом приближении проводимость системы имеет вид

$$\sigma(k,\omega) = \frac{ie^2}{mk^2}\frac{1}{V}\sum_p\frac{\vec{p}\vec{k}}{m}\left(-\frac{\partial n_p}{\partial\varepsilon_p}\right)\frac{1}{\omega+i\gamma_p} \approx$$
$$\approx \frac{ie^2}{m^2}\frac{1}{3}p_F^2\frac{1}{\omega+i\bar{\gamma}}\frac{1}{V}\sum_p\left(-\frac{\partial n_p}{\partial\varepsilon_p}\right).$$

Учитывая соотношение

$$\frac{1}{V}\sum_p \left(-\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right) = \frac{\partial}{\partial \mu}\frac{1}{V}\sum_p n_p = \frac{\partial}{\partial \mu}\frac{N_e}{V} = \frac{mp_F}{\pi^2},$$

где $p_F^3 = 3\pi^2 n_e$; $\mu = \frac{p_F^2}{2m}$; $n_e = \frac{N_e}{V}$ – плотность электронов, получим

$$\sigma(\omega) = \sigma(k,\omega)|_{k\to 0} = Re\frac{ie^2}{m}\frac{n_e}{\omega + \bar{\gamma}} = \frac{n_e e^2}{m}\frac{\gamma}{\omega^2 + \bar{\gamma}^2}.$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении мы получаем обычную формулу для проводимости, где $\bar{\gamma} = 1/\tau$ – обратное время свободного пробега электронов.

Перейдем теперь к более детальному расчету проводимости металла. Для упрощения вычислений рассмотрим отдельно примесное и фононное рассеяния электронов.

9.3 Примесное рассеяние

Введем запаздывающую функцию Грина

$$G_p(k, t-t') = \langle\langle a_p(t) a_{p+k}(t); \rho_{-k}\rangle\rangle.$$

Запишем для нее уравнение движения

$$i\frac{dG_p(k,t-t')}{dt} = \delta(t-t')\{n_p - n_{p+k}\} + \varepsilon_{p+k}G_p(k,t-t') -$$
$$-\varepsilon_p G_p(k,t-t') + \sum_{q\neq 0} V_i(\vec{q})S(\vec{q})\{\langle\langle a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle -$$
$$-\langle\langle a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\}. \quad (118)$$

Для функций Грина, стоящих в правой части уравнения (118), мы также можем записать уравнения движения в виде

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\{n_p\delta_{q,0} - n_{p+k}\delta_{q,0}\} +$$
$$+(\varepsilon_{p+k-q} - \varepsilon_p)\langle\langle a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle +$$
$$+\sum_{q'\neq 0} V_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{\langle\langle a_p^+(t)a_{p+k-q-q'}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle -$$
$$-\langle\langle a_{p+q'}^+(t)a_{p+k-q}(t');\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\}. \quad (119)$$

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\{n_p\delta_{q,0} - n_{p+k}\delta_{q,0}\} +$$

$$+(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_{p+q})\langle\langle a^+_{p+q}(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle+$$
$$+\sum_{q'\neq 0}V_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{\langle\langle a^+_{p+q}(t)a_{p+k-q'}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle-$$
$$-\langle\langle a^+_{p+q+q'}(t)a_{p+k}(t');\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\}. \qquad (120)$$

Переходя к фурье-образам, получаем цепочку зацепляющихся уравнений

$$(\omega-\varepsilon_{p+k}+\varepsilon_p)G_p(k,\omega)=\{n_p-n_{p+k}\}+\varepsilon_{p+k}G_p(k,t-t')-\varepsilon_pG_p(k,t-t')+$$
$$+\sum_{q\neq 0}V_i(\vec{q})S(\vec{q})\{\langle\langle a^+_p a_{p+k-q}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega-\langle\langle a^+_{p+q}a_{p+k}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\}. \qquad (121)$$

$$(\omega-\varepsilon_{p+k-q}+\varepsilon_p)\langle\langle a^+_p a_{p+k-q}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega=\{n_p\delta_{q,0}-n_{p+k}\delta_{q,0}\}+$$
$$+\sum_{q'\neq 0}V_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{\langle\langle a^+_p a_{p+k-q-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega-\langle\langle a^+_{p+q'}a_{p+k-q}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\}. \qquad (122)$$

$$(\omega-\varepsilon_{p+k}+\varepsilon_{p+q})\langle\langle a^+_{p+q}a_{p+k}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega=\{n_p\delta_{q,0}-n_{p+k}\delta_{q,0}\}+$$
$$+\sum_{q'\neq 0}V_i(\vec{q}')S(\vec{q}')\{\langle\langle a^+_{p+q}a_{p+k-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega-\langle\langle a^+_{p+q+q'}a_{p+k}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\}. \qquad (123)$$

Как следует из (122) и (123), функции Грина $\langle\langle a^+_p a_{p+k-q}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega$ и $\langle\langle a^+_{p+q}a_{p+k}(t)|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\}$ пропорциональны примесному рассеянию $V_i(\vec{q})S(\vec{q})$, то есть имеют высший порядок малости по рассеянию по сравнению с функцией $G_p(k,\omega)$. Поэтому для вычисления затухания функций Грина во втором порядке по рассеянию достаточно сохранить в правых частях уравнений (122) и (123) только слагаемые с $q'=-q$

$$\langle\langle a^+_p a_{p+k-q-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{-q',q}G_p(k,\omega),$$
$$\langle\langle a^+_{p+q'}a_{p+k-q}(t)|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\}\approx\delta_{-q',q}G_{p-q}(k,\omega), \qquad (124)$$
$$\langle\langle a^+_{p+q}a_{p+k-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{-q',q}G_{p+k}(k,\omega),$$
$$\langle\langle a^+_{p+q+q'}a_{p+k}(t)|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\}\approx\delta_{-q',q}G_p(k,\omega).$$

С учетом расцеплений (124) уравнения (122) и (123) при $q\neq 0$ примут вид

$$(\omega-\varepsilon_{p+k-q}+\varepsilon_p)\langle\langle a^+_p a_{p+k-q}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega=$$
$$=V_i(-\vec{q})S(-\vec{q})\{G_p(k,\omega)-G_{p-q}(k,\omega)\}. \qquad (125)$$
$$(\omega-\varepsilon_{p+k}+\varepsilon_{p+q})\langle\langle a^+_{p+q}a_{p+k}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega=$$
$$=V_i(-\vec{q})S(-\vec{q})\{\{G_{p+q}(k,\omega)-G_p(k,\omega)\}. \qquad (126)$$

В результате цепочка кинетических уравнений замыкается, и для функции Грина $G_p(k,\omega)$ в длинноволновом приближении ($k \to 0$) получаем

$$\omega G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{(\vec{k}\vec{p})}{m} +$$

$$+\sum_{\vec{q}\neq 0} |V_i(\vec{q})|^2 |S(\vec{q})|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \varepsilon_{p-q} + \varepsilon_p} G_p(k,\omega) + \frac{1}{\omega - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q}} G_p(k,\omega) - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\omega - \varepsilon_{p-q} + \varepsilon_p} G_{p-q}(k,\omega) - \frac{1}{\omega - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q}} G_{p+q}(k,\omega) \right\}. \qquad (127)$$

Так как в сумме по $\vec{q}$ каждому слагаемому $\vec{q}$ соответствует слагаемое $-\vec{q}$, то в первом и четвертом слагаемом в правой части уравнения (127) мы можем сделать замену $p-q \to p+q$. Тогда окончательно уравнение (127) можно записать в виде

$$\omega G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{(\vec{k}\vec{p})}{m} + \sum_q \{W_{p,p+q} G_p(k,\omega) - W_{p+q,p} G_{p+q}(k,\omega)\}, \qquad (128)$$

где

$$W_{p,p+q}(\omega) = |V_i(\vec{q})|^2 S(\vec{q})|^2 \left(\frac{1}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} + \omega} + \frac{1}{\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p + \omega} \right) \qquad (129)$$

или

$$\omega G_p(k,\omega) = \frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{(\vec{k}\vec{p})}{m} + \sum_{p'} \{W_{p,p'} G_p(k,\omega) - W_{p',p} G_{p'}(k,\omega)\}.$$

Решение уравнения (128) можно представить в виде

$$G_p(k,\omega) = \frac{n_p - n_{p+k}}{\omega - M_p(k,\omega)},$$

где $M_p(k,\omega)$ – массовый оператор, который в нашем случае представляет собой комбинацию коэффициентов W.

Поскольку нас интересует лишь эффект затухания функций Грина и случай $k \ll k_F, \quad \omega \ll \omega_0$, мы можем оставить в массовом операторе как и прежде лишь мнимую часть

$$M_p(k,\omega + i\varepsilon) \approx -i\gamma_p(k,\omega) \approx -i\gamma_p$$

и для функции Грина

$$G_p(k,\omega) = \frac{n_p - n_{p+k}}{\omega + \gamma_p} = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon}\frac{\vec{k}\vec{v}}{\omega + i\gamma_p}. \qquad (130)$$

Тогда для вычисления мнимой части массового оператора мы можем положить $\omega = i\varepsilon$. Усредняя также по распределению примесей

$$\langle |S(\vec{q})|^2 \rangle_i = \frac{1}{N^2} \sum_{ll'} e^{-i\vec{q}(\vec{l}-\vec{l}')} \langle C_l C_{l'} \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{ll'} C_l \delta_{ll'} = \frac{N_i}{N^2} = \frac{C}{N},$$

получим

$$ImW_{p,p+q}(i\varepsilon) = -2\pi |V_i(\vec{q})|^2 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}).$$

Тогда уравнение (128) для функции Грина G_p примет вид

$$\omega G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p} \frac{\vec{k}\vec{p}}{m} -$$

$$-2\pi \frac{C}{N} \sum_q |V_i(q)|^2 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}) \{G_p(k,\omega) - G_{p+k}(k,\omega)\}. \tag{131}$$

Ищем решение уравнения (131) в виде (130). Тогда с учетом условия $\omega \ll \omega_0$ получаем

$$\gamma_p = 2\pi \frac{C}{N} \sum_q |V_i(q)|^2 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}) \left(1 - \frac{\cos\theta'}{\cos\theta}\right), \tag{132}$$

где θ' – угол между векторами $\vec{k}$ и $\vec{p}'$, а θ – угол между векторами $\vec{k}$ и $\vec{p}$ ($\vec{p}' = \vec{p} + \vec{q}$). Перейдем в (132) от суммирования к интегрированию по $\vec{q}$. Удобно выбрать систему координат в q-пространстве так, чтобы ось z была направлена по вектору $\vec{p}$, а вектор $\vec{k}$ лежал в плоскости xoz. Тогда, используя известную формулу стереометрии, получаем

$$\cos\theta' = \cos\theta \cos\theta_1 + \sin\theta \sin\theta_1 \cos\phi,$$

где θ_1 – угол между векторами $\vec{p}$ и $\vec{p}'$. При интегрировании по $\vec{q}$ интеграл от $\cos\phi$ по переменной ϕ будет равен нулю, тогда

$$\gamma_p = 2\pi \frac{C}{N} \sum_q |V_i(q)|^2 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}) \left(1 - \cos\theta_{p,p+q}\right).$$

Учитывая. что электронный газ в металлах является вырожденным, можно заметить, что $\left(-\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right)$ ведет себя как $\delta(\varepsilon_p - \varepsilon_F)$. Тогда мы можем усреднить затухание по поверхности Ферми (по всем электронам проводимости)

$$\bar{\gamma}_{imp} = -\int_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon_p \left(\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\right) \gamma_p = 2\pi \frac{C}{N} \sum_q |V_i(q)|^2 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}) \left(1 - \frac{\cos\theta'}{\cos\theta}\right). \tag{133}$$

Затухание (133) не зависит от температуры и остается конечным при $T = 0$. Рассеяние на примесях приводит к остаточному сопротивлению металлов.

Соответственно одночастичную функцию Грина G_p с усредненным по поверхности Ферми затуханием (133) можно представить в виде

$$G_p(k,\omega) = -\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p}\frac{\vec{k}\vec{v}}{\omega + i\bar{\gamma}_{imp}}. \tag{134}$$

9.4 Рассеяние на фононах

Рассмотрим теперь сопротивление металла, обусловленное наличием электрон-фононного рассеяния.

Запишем для функции $G_p(k, t-t')$ уравнение движения, учитывая лишь рассеяние электронов на фононах:

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_p(k,t-t')}{dt} &= \delta(t-t')\{n_p - n_{p+k}\} + \varepsilon_{p+k}G_p(k,t-t') - -\varepsilon_p G_p(k,t-t') + \\
&+ \sum_q F_q\{\langle\langle b_q(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle + \\
&+\langle\langle b_{-q}^+(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle - \\
&-\langle\langle b_q(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle - \\
&-\langle\langle b_{-q}^+(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\}.
\end{aligned} \tag{135}$$

Для упрощения записей введем обозначения:

$$\begin{aligned}
G_1p(k,q,t-t') &= \langle\langle b_q(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle, \\
G_2p(k,q,t-t') &= \langle\langle b_{-q}^+(t)a_p^+(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle, \\
G_3p(k,q,t-t') &= \langle\langle b_q(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle, \\
G_4p(k,q,t-t') &= \langle\langle b_{-q}^+(t)a_{p+q}^+(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle.
\end{aligned} \tag{136}$$

Запишем для функций Грина (136) уравнения движения:

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_{1p}(k,q,t-t')}{dt} &= (\varepsilon_{p+k-q} - \varepsilon_p)G_{1p}(k,q,t-t') + \omega_q G_{1p}(k,q,t-t') + \\
&+ \sum_{p'} F_{-q}\langle\langle a_p^+(t)a_{p+k-q}(t)a_{p'}^+(t)a_{p'+q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle + \\
&+ \sum_{q'} F_{q'}\left\{\langle\langle (b_{-q'}^+(t)b_q(t) + b_{q'}(t)b_q(t))a_p^+(t)a_{p+k-q-q'}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle - \right.
\end{aligned}$$

$$-\langle\langle(b^+_{-q'}(t)b_q(t)+b_{q'}(t)b_q(t))a^+_{p+q'}(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\Big\}\,. \qquad (137)$$

$$i\frac{dG_{2p}(k,q,t-t')}{dt}=(\varepsilon_{p+k-q}-\varepsilon_p)G_{2p}(k,q,t-t')-\omega_qG_{2p}(k,q,t-t')-$$

$$-\sum_{p'}F_{-q}\langle\langle a^+_p(t)a_{p+k-q}(t)a^+_{p'}(t)a_{p'+q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle+$$

$$+\sum_{q'}F_{q'}\Big\{\langle\langle(b_{q'}(t)b^+_{-q}(t)+b^+_{-q'}(t)b^+_{-q}(t))a^+_p(t)a_{p+k-q-q'}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle-$$

$$-\langle\langle(b_{q'}(t)b^+_{-q}(t)+b^+_{-q'}(t)b^+_{-q}(t))a^+_{p+q'}(t)a_{p+k-q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\Big\}\,. \qquad (138)$$

$$i\frac{dG_{3p}(k,q,t-t')}{dt}=(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_{p+q})G_{3p}(k,q,t-t')+\omega_qG_{3p}(k,q,t-t')+$$

$$+\sum_{p'}F_{-q}\langle\langle a^+_{p+q}(t)a_{p+k}(t)a^+_{p'}(t)a_{p'+q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle+$$

$$+\sum_{q'}F_{q'}\Big\{\langle\langle(b^+_{-q'}(t)b_q(t)+b_{q'}(t)b_q(t))a^+_{p+q}(t)a_{p+k-q'}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle-$$

$$-\langle\langle(b^+_{-q'}(t)b_q(t)+b_{q'}(t)b_q(t))a^+_{p+q+q'}(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\Big\}\,. \qquad (139)$$

$$i\frac{dG_{4p}(k,q,t-t')}{dt}=(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_{p+q})G_{4p}(k,q,t-t')-\omega_qG_{4p}(k,q,t-t')-$$

$$-\sum_{p'}F_{-q}\langle\langle a^+_{p+q}(t)a_{p+k}(t)a^+_{p'}(t)a_{p'+q}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle+$$

$$+\sum_{q'}F_{q'}\Big\{\langle\langle(b_{q'}(t)b^+_{-q}(t)+b^+_{-q'}(t)b^+_{-q}(t))a^+_{p+q}(t)a_{p+k-q'}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle-$$

$$-\langle\langle(b_{q'}(t)b^+_{-q}(t)+b^+_{-q'}(t)b^+_{-q}(t))a^+_{p+q+q'}(t)a_{p+k}(t);\rho_{-k}(t')\rangle\rangle\Big\}\,. \qquad (140)$$

Переходя к фурье-образам и используя расцепления для функций Грина вида

$$\langle\langle a^+_p a_{p+k-q}a^+_{p'}a_{p'+q}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx(1-n_{p+k-q})\delta_{p',p+k-q}G_p-n_p\delta_{p,p'+q}G_{p-k},$$

$$\langle\langle a^+_{p+q}a_{p+k}a^+_{p'}a_{p'+q}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx(1-n_{p+k})\delta_{p',p+k}G_{p+q}-n_{p+q}\delta_{p+q,p'+q}G_p,$$

$$\langle\langle b^+_{-q'}b_qa^+_pa_{p+k-q-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{q,-q'}N_qG_p,$$

$$\langle\langle b^+_{-q'}b_qa^+_{p+q'}a_{p+k-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{q,-q'}N_qG_{p-q},$$

$$\langle\langle b_{q'}b^+_{-q}a^+_pa_{p+k-q-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{q,-q'}(1+N_q)G_p,$$

$$\langle\langle b_{q'}b^+_{-q}a^+_{p+q'}a_{p+k-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{q,-q'}(1+N_q)G_{p-q},$$

$$\langle\langle b^+_{-q'}b_qa^+_{p+q}a_{p+k-q'}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{q,-q'}N_qG_{p+q},$$

$$\langle\langle b^+_{-q'}b_qa^+_{p+q+q'}a_{p+k}|\rho_{-k}\rangle\rangle_\omega\approx\delta_{q,-q'}N_qG_p,$$

$$\langle\langle b_{q'} b^{+}_{-q} a^{+}_{p+q} a_{p+k-q'} | \rho_{-k} \rangle\rangle_{\omega} \approx \delta_{q,-q'}(1+N_q) G_{p+q},$$

$$\langle\langle b_{q'} b^{+}_{-q} a^{+}_{p+q+q'} a_{p+k} | \rho_{-k} \rangle\rangle_{\omega} \approx \delta_{q,-q'}(1+N_q) G_{p},$$

а также полагая функции Грина типа $\langle\langle b_{q'} b_q a^{+}_{p} a_{p+k-q-q'} | \rho_{-k} \rangle\rangle_{\omega}$ и $\langle\langle b^{+}_{-q'} b^{+}_{-q} a^{+}_{p} a_{p+k-q-q'} | \rho_{-k} \rangle\rangle_{\omega}$ равными нулю, можно получить замкнутую цепочку уравнений вида

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_p) G_p(k,\omega) = n_p - n_{p+k} +$$

$$+ \sum_q F_q \{ G_{1p}(k,q,\omega) + G_{2p}(k,q,\omega) - G_{3p}(k,q,\omega) - G_{4p}(k,q,\omega) \}, \qquad (141)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k-q} + \varepsilon_p - \omega_q) G_{1p}(k,q,\omega) = F_{-q} \left\{ (1 - n_{p+k-q}) G_p(k,\omega) - \right.$$

$$\left. - n_p G_{p-q}(k,\omega) + N_q G_p(k,\omega) - N_q G_{p-q}(k,\omega) \right\}, \qquad (142)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k-q} + \varepsilon_p + \omega_q) G_{2p}(k,q,\omega) = F_{-q} \left\{ -(1 - n_{p+k-q}) G_p(k,\omega) + \right.$$

$$\left. + n_p G_{p-q}(k,\omega) + (1+N_q) G_p(k,\omega) - (1+N_q) G_{p-q}(k,\omega) \right\}, \qquad (143)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} - \omega_q) G_{3p}(k,q,\omega) = F_{-q} \left\{ (1 - n_{p+k}) G_{p+q}(k,\omega) - \right.$$

$$\left. - n_{p+q} G_p(k,\omega) + N_q G_{p+q}(k,\omega) - N_q G_p(k,\omega) \right\}, \qquad (144)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} + \omega_q) G_{4p}(k,q,\omega) = F_{-q} \left\{ -(1 - n_{p+k}) G_{p+q}(k,\omega) + \right.$$

$$\left. + n_{p+q} G_p(k,\omega) + (1+N_q) G_{p+q}(k,\omega) - (1+N_q) G_p(k,\omega) \right\}. \qquad (145)$$

В длинноволновом приближении $k \to 0$ уравнения (141)–(145) можно записать в виде

$$\omega G_p(\omega) = n_p - n_{p+k} +$$

$$+ \sum_q F_q \{ G_{1p}(q,\omega) + G_{2p}(q,\omega) - G_{3p}(q,\omega) - G_{4p}(q,\omega) \}, \qquad (146)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_p - \omega_q) G_{1p}(q,\omega) = F_{-q} \left\{ (1 - n_{p+q}) G_p(\omega) - \right.$$

$$\left. - n_p G_{p+q}(\omega) + N_q G_p(\omega) - N_q G_{p+q}(\omega) \right\}, \qquad (147)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_p + \omega_q) G_{2p}(q,\omega) = F_{-q} \left\{ -(1 - n_{p+q}) G_p(\omega) + \right.$$

$$\left. + n_p G_{p+q}(\omega) + (1+N_q) G_p(\omega) - (1+N_q) G_{p-q}(\omega) \right\}, \qquad (148)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} - \omega_q) G_{3p}(q,\omega) = F_{-q} \left\{ (1 - n_{p+k}) G_{p+q}(\omega) - \right.$$

$$\left. - n_{p+q} G_p(\omega) + N_q G_{p+q}(\omega) - N_q G_p(\omega) \right\}, \qquad (149)$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+k} + \varepsilon_{p+q} + \omega_q) G_{4p}(q,\omega) = F_{-q} \left\{ -(1 - n_{p+k}) G_{p+q}(\omega) + \right.$$

$$+n_{p+q}G_p(k,\omega) + (1+N_q)G_{p+q}(\omega) - (1+N_q)G_p(\omega)\} \,. \tag{150}$$

При записи уравнений (146)–(150) мы, как и в предыдущем случае, сделали замену переменных $p-q \to p+q$.

Приводя подобные члены, мы можем переписать уравнения (147)–(150) в виде

$$(\omega - \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_p - \omega_q)G_{1p} = F_{-q}\left\{(1-n_{p+q}+N_q)G_p - (n_p+N_q)G_{p+q}\right\},$$

$$(\omega - \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_p - \omega_q)G_{1p} = F_{-q}\left\{(1-n_{p+q}+N_q)G_p - (n_p+N_q)G_{p+q}\right\},$$

$$(\omega + \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p - \omega_q)G_{1p} = F_{-q}\left\{-(n_{p+q}+N_q)G_p + (1-n_p+N_q)G_{p+q}\right\},$$

$$(\omega + \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p + \omega_q)G_{1p} = F_{-q}\left\{-(1-n_{p+q}+N_q)G_p + (n_p+N_q)G_{p+q}\right\}.$$

Тогда для исходной функции Грина $G_p(\omega)$ мы получаем окончательно уравнение вида (128) с функцией

$$W_{p,p+q} = |F_q|^2\left[\frac{2\omega(1-n_{p+q}+N_q)}{\omega^2-(\varepsilon_{p+q}+\varepsilon_p-\omega_q)^2} + \frac{2\omega(n_{p+q}+N_q)}{\omega^2-(\varepsilon_{p+q}+\varepsilon_p+\omega_q)^2}\right], \tag{151}$$

где $N_q = \langle b_q^+ b_q\rangle = \left(e^{\omega_k/k_BT}-1\right)^{-1}$, $\qquad n_p = \langle a_p^+ a_p\rangle = \left(e^{\varepsilon_p/k_BT}+1\right)^{-1}$. Полагая в (151) $\omega = i\varepsilon \to 0$, запишем решение уравнения (128) в виде (134), где для усредненного по поверхности Ферми фононного затухания имеем

$$\bar{\gamma}_{ph} = \int\limits_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon_p\left(-\frac{\partial n_p}{\partial\varepsilon_p}\right)\gamma_p = \int\limits_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon_p\left\{\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p} Im W_{p,p+q}(i\varepsilon) - \right.$$

$$\left. -\frac{\vec{p}(\vec{p}+\vec{q})}{p^2}\frac{\partial n_{p+q}}{\partial\varepsilon_{p+q}} Im W_{p+q,p}(i\varepsilon)\right\} =$$

$$= 2\pi\sum_q |F_q|^2\frac{\omega_q}{k_BT}(1-\cos\theta)N_q(1+N_q)[\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{p+q}-\omega_q)+$$

$$+\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{p+q}+\omega_q)], \tag{152}$$

где

$$\cos\theta = \vec{p}(\vec{p}+\vec{q})/p^2, \qquad p = p_F.$$

Переходя в формуле (152) от суммирования к интегрированию по q и используя приближение дебаевского спектра фононов $\omega_q = cq$ и $|F_q|^2 = const\ q$, где c – скорость звука, получаем для фононного затухания

$$\gamma_{ph} = 4\gamma_0\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5 \int\limits_0^{\theta_D/T}\frac{x^5dx}{(e^x-1)(1-e^{-x})},$$

где $\gamma_0 \approx \theta_D$ – температура Дебая.

В случае высоких температур $T \gg \theta_D$ предел интегрирования $\theta_D/T \ll 1$, так что можно разложить

$$e^x \approx 1 + x, \qquad e^{-x} \approx 1 - x$$

и получить

$$\gamma_{ph} \approx \gamma_0 \frac{T}{\theta_D}.$$

Соответственно для проводимости и удельного сопротивления имеем

$$\sigma_{ph} \approx n_e e^2 m \frac{1}{\gamma_{ph}} \approx \frac{n_e e^2}{m\gamma_0} \frac{\theta_D}{T}, \qquad \rho_{ph} = \frac{1}{\sigma_{ph}} \sim \frac{T}{\theta_D}.$$

В случае низких температур $T \ll \theta_D$ предел интегрирования $\theta_D/T \to \infty$. Тогда интеграл

$$\int\limits_0^\infty \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \approx 124,4.$$

В результате для затухания имеем

$$\gamma_{ph} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5$$

и для проводимости и удельного сопротивления

$$\sigma_{ph} \sim \left(\frac{\theta_D}{T}\right)^5, \qquad \rho_{ph} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5.$$

Таким образом, при низких температурах сопротивление металлов, обусловленное рассеянием электронов на фононах, пропорционально абсолютной температуре T, а при высоких температурах пропорционально пятой степени абсолютной температуры T^5. Полученные в рамках метода функций Грина результаты для сопротивления металлов в случае примесного и фононного рассеяний в основном согласуются с экспериментом.

Библиографический список

1. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1962. 443 с.

2. Киржниц Д.А. Полевые методы теории многих частиц. М.: Гос. изд. по атомной науке и технике, 1963. 344 с.

3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Том IX. Е.М.Лившиц, Л.П. Питаевский. Статистическая физика. М.: Наука, 1978. 448 с.

4. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. Запаздывающие и опережающие функции Грина в статистической физике // ДАН СССР. 1959. Т.126. С.53.

5. Зубарев Д.Н. Двухвременные температурные функции Грина в статистической физике // УФН. 1960. Т.71. С.71.

6. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 415 с.

7. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 546 с.

8. Бонч-Бруевич В.М., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике. М.: Наука, 1961.

9. Плакида Н.М. Некоторые вопросы квантовой теории твердого тела (Метод двухвременных функций Грина). Дубна. ОИЯИ. 1974. 153 с.

10. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н.(мл.) Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984. 384 с.

11. Репке Г. Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990. 320 с.

12. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 388 с.

13. Рудой Ю.Г. Современное состояние метода двухвременных функций Грина в квантовой теории магнетизма. В кн.: Статистическая физика и квантовая теория поля / Под. ред. Н.Н.Боголюбова. М.: Наука, 1973. 456 с.

14. Кащеев В.Н. Термодинамика ферромагнетика вблизи точки Кюри. Рига. Зинатне, 1966. 116 с.

15. Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. Функции Грина в теории магнетизма. Киев. Наукова Думка, 1984, 336 с.

16. Квасников И.А., Озрин В.Д., Олейников В.П. Двухвременной температурный формализм в теории нормальных ферми-систем. Ч.1. Система частиц с кулоновским взаимодействием. Препринт ИТФ-69-62, Киев, ИТФ, 1969, 49 с; Ч.2.Цепочка уравнений для функций Грина. Препринт

ИТФ-70-54, Киев, ИТФ, 1969, 40 с; Ч.3. Квазичастичные возбуждения в вырожденной системе. Препринт ИТФ-71-84Р, Киев, ИТФ, 1971, 104 с;

17. Дудкин С.И. Функции Грина в теории поглощения света кристаллами. Киев. Наукова Думка, 1983, 176 с.

18. Башкиров Е.К., Боголюбов Н.Н.(мл.), Шумовский А.С. Об оценке времени конверсии в двухуровневых макроскопических системах. // ТМФ 1983. Т.56. С.395.

19. Башкиров Е.К. Метод исключения бозонных переменных в квантовой теории сверхизлучения. Самара. Изд-во СамГУ, 2008. 55 с.

20. Задачи по термодинамике и статистической физике / Под. ред. П.Ландсберга. М.: Мир, 1974. 640 с.

21. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М.: Мир, 1975. 400 с.

22. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967. 350 с.

Учебное электронное издание

Башкиров Евгений Константинович

МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Электронное учебное пособие

Публикуется в авторской редакции
Титульное редактирование *Т. И. Кузнецовой*
Компьютерная верстка, макет *Е. К. Башкирова*

Управление по информационно-издательской деятельности Самарского государственного университета: www.infopress.samsu.ru
Издательство «Самарский университет», 443011, г.Самара, ул. Акад. Павлова, 1.
Тел. 8(846) 334-54-23