Глава 7
ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

7.1. Мацубаровское время

Рассмотрим теперь диаграммную технику для систем при конечной температуре. Обобщение нуль-температурной техники на конечные температуры оказывается удивительно простым и красивым. Оно называется *диаграммной техникой Мацубары*.

Основная задача, решаемая в статистической физике равновесных систем, состоит в усреднении различных величин по распределению Гиббса. При этом рассматриваются средние вида

$$\left\langle \widehat{A}\ldots\widehat{B}\right\rangle_{\text{т}} = \sum_n w_n \left\langle n\middle|\widehat{A}\ldots\widehat{B}\middle|n\right\rangle, \tag{7.1}$$

где индекс «т» указывает на то, что среднее берется по распределению вероятностей различных состояний при конечной температуре T:

$$w_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}, \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}. \tag{7.2}$$

Здесь $|n\rangle$ — собственное состояние системы с энергией E_n, w_n — вероятность пребывания в этом состоянии, $\beta = 1/T$ — обратная температура, а Z — статистическая сумма. Выражение (7.1) можно записать так:

$$\left\langle \widehat{A}\ldots\widehat{B}\right\rangle_{\text{т}} = \frac{\operatorname{Tr}\left(\widehat{A}\ldots\widehat{B}\, e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}}\right)}{\operatorname{Tr} e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}}}. \tag{7.3}$$

Теория возмущений, позволяющая находить подобные средние, строится следующим образом. Представим гамильтониан в виде $\widehat{\mathscr{H}} = \widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}$, где $\widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}$ — возмущение. В основе мацубаровской техники лежит аналогия между операторной экспонентой гамильтониана

$$\widehat{\mathcal{U}}_\beta = \exp\left[-\beta\left(\widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}\right)\right] \tag{7.4}$$

и квантовомеханическим оператором эволюции

$$\widehat{U}(t) = \exp\left[-it\left(\widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}\right)\right]. \tag{7.5}$$

Переход от $\widehat{U}(t)$ к $\widehat{\mathcal{U}}_\beta$ осуществляется простой заменой: $t \to -i\beta$.

Оказывается, что такая аналогия имеет далеко идущие последствия. А именно, можно рассмотреть эволюцию системы во мнимом времени $t = -i\tau$ (τ называют также *мацубаровским временем*). Введем гейзенберговские операторы

$$\widehat{A}_M(\tau) = e^{\tau\widehat{\mathscr{H}}}\,\widehat{A}\,e^{-\tau\widehat{\mathscr{H}}}. \tag{7.6}$$

Эволюция этих операторов во мнимом времени дается уравнением

$$\frac{d\widehat{A}_M(\tau)}{d\tau} = \left[\widehat{\mathscr{H}},\ \widehat{A}_M(\tau)\right]. \tag{7.7}$$

Далее можно ввести мацубаровское представление взаимодействия:

$$\widehat{A}(\tau) = e^{\tau\widehat{\mathscr{H}}_0}\,\widehat{A}\,e^{-\tau\widehat{\mathscr{H}}_0} \tag{7.8}$$

и мацубаровскую S-матрицу:

$$\widehat{\mathcal{S}}(\tau) = e^{-\tau\widehat{\mathscr{H}}}\,e^{\tau\widehat{\mathscr{H}}_0}. \tag{7.9}$$

Нетрудно проверить, что эта S-матрица удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\widehat{\mathcal{S}}(\tau)}{d\tau} = -\widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}(\tau)\widehat{\mathcal{S}}(\tau), \tag{7.10}$$

где

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}(\tau) = e^{\tau\widehat{\mathscr{H}}_0}\,\widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}\,e^{-\tau\widehat{\mathscr{H}}_0} \tag{7.11}$$

— оператор возмущения, записанный в представлении взаимодействия. Решение уравнения (7.10) имеет вид

$$\widehat{\mathcal{S}}(\tau) = \mathrm{T}_\tau \exp\left(-\int_0^\tau \widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}(\tau)\,d\tau\right). \tag{7.12}$$

Символ T_τ обозначает хронологическое упорядочение операторов по мацубаровскому времени τ. Эта процедура аналогична обычному T-упорядочению (ср. с выражением (2.3)).

В мацубаровском представлении взаимодействия средние (7.3) принимают следующий вид:

$$\left\langle \widehat{A}\ldots\widehat{B}\right\rangle_{\text{т}} = \frac{\operatorname{Tr}\left(\widehat{A}(\beta)\ldots\widehat{B}(\beta)\widehat{\mathcal{S}}(\beta)e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}_0}\right)}{\operatorname{Tr}\left(\widehat{\mathcal{S}}(\beta)e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}_0}\right)}. \tag{7.13}$$

Для вывода этого соотношения надо воспользоваться тем, что операторы под знаком следа можно переставлять циклически. Таким образом,

$$\left\langle \widehat{A}\ldots\widehat{B}\right\rangle_{\text{т}} = \frac{\left\langle \widehat{A}(\beta)\ldots\widehat{B}(\beta)\,\widehat{\mathcal{S}}(\beta)\right\rangle_{\text{т},0}}{\left\langle \widehat{\mathcal{S}}(\beta)\right\rangle_{\text{т},0}}, \tag{7.14}$$

где усреднение $\langle \ldots \rangle_{\mathrm{т},0}$ обозначает $\mathrm{Tr}(\ldots e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}_0})/\,\mathrm{Tr}(e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}_0})$ — среднее по распределению Гиббса с невозмущенным гамильтонианом $\widehat{\mathscr{H}}_0$.

Таким образом, возникающие формулы отличаются от случая $T=0$ в основном заменой времени t на $-i\tau$. Другое отличие заключается в следующем. Усредняя по основному состоянию при $T=0$, мы полагали, что возмущение при $t=-\infty$ отсутствует, а затем медленно включается. Поэтому во всех выражениях возникали величины $\widehat{S}(t,-\infty)$, $\widehat{S}(\infty,t)$ и $\widehat{S}(\infty,-\infty)$. При конечной же температуре во все формулы входит $\widehat{\mathcal{S}}(\tau)$ только при $0<\tau<\beta$. Поэтому в мацубаровской технике нас интересует эволюция системы во мнимом времени в интервале от 0 до β.

Кроме того, в выражение (7.14) входит след, т. е. сумма вида $\sum_n \langle n|\ldots|n\rangle$. Это означает, что на квантовомеханическую задачу накладывается дополнительное ограничение: через время β система обязана вернуться в исходное состояние. Поэтому оказывается удобным считать, что мацубаровское время — это переменная, принимающая значения на окружности, а β — длина этой окружности.

Таким образом, мы приходим к важному выводу: вычисление средних по распределению Гиббса сводится к квантовомеханической задаче во мнимом времени $0<\tau<\beta$ с периодическими по времени граничными условиями.

Теперь можно развить теорию возмущений для вычисления термодинамических величин. Для этого вводится так называемая мацубаровская функция Грина:

$$G(\mathbf{r},\,\mathbf{r}',\,\tau,\,\tau') = -\langle \mathrm{T}_\tau\, \psi(\mathbf{r},\tau)\, \psi^+(\mathbf{r}'\,\tau')\rangle_{\mathrm{т}}. \tag{7.15}$$

(Для ферми- и бозе-статистики знак один и тот же.)

Поскольку в нашей задаче всегда $0<\tau<\beta$, то $-\beta<\tau-\tau'<\beta$. Поэтому функция Грина (7.15) определена на отрезке $[-\beta,\beta]$. Кроме того, можно показать (см. [1], § 11), что

$$G(\tau) = \pm G(\tau+\beta), \tag{7.16}$$

верхний знак относится к бозевским частицам, а нижний — к фермиевским.

С помощью функции Грина можно вычислять τ-упорядоченные средние. Как и в диаграммной технике при $T=0$, в мацубаровской технике верна теорема Вика, поэтому τ-упорядоченное произведение ψ-операторов всегда можно выразить через парные средние. Это, в свою очередь, означает, что можно построить диаграммную технику для вычисления таких средних. В координатном пространстве правила практически совпадают с правилами диаграммной техники при $T=0$, за тем исключением, что область интегрирования по мацубаровскому времени τ есть отрезок $[0,\beta]$. Кроме того, коэффициент перед мацубаровской диаграммой есть $(-1)^{n+F}$ (n — порядок теории возмущений, F — число фермионных петель), а не $i^n(-1)^F$, как в обычной технике.

7.2. Дискретные частоты

Вычисления в мацубаровской технике почти всегда проще производить не во временно́м, а в частотном представлении. Опишем, как выглядит соответствующий формализм. Поскольку функции Грина определены на отрезке $[-\beta,\beta]$, их можно разложить в ряд Фурье:

$$G(\tau,\mathbf{r},\mathbf{r}') = T\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}\, G(i\omega_n,\mathbf{r},\mathbf{r}'), \tag{7.17}$$

где $\omega_n = \pi n/\beta$, а множитель T в (7.17) введен для удобства. Условие (анти)периодичности (7.16) означает, что $G(i\omega_n)\neq 0$ для $\omega_n = 2\pi nT$ в случае бозе-частиц, и $\omega_n=(2n+1)\pi T$ в случае фермионов. Поэтому в мацубаровской технике частота принимает *дискретные* значения — четные для бозонов и нечетные для фермионов. Роль дискретной частоты ω_n в мацубаровской технике — такая же, как у энергии в обычной технике. Поэтому основное отличие диаграммной техники в частотном представлении состоит в замене интегралов по энергиям в функциях Грина на суммы по дискретным частотам. При этом сумма частот в вершине обязательно равна нулю («закон сохранения энергии»).

Приведем выражения для электронной и фононной функций Грина в импульсном представлении:

$$G(i\varepsilon_n,\,\mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})}, \quad \varepsilon_n = (2n+1)\pi T; \tag{7.18}$$

$$D(i\omega_n,\,\mathbf{k}) = -\frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega_n^2+\omega_0^2(\mathbf{k})}, \quad \omega_n = 2\pi nT. \tag{7.19}$$

Заметим, что эти выражения можно получить из причинных функций Грина заменой $\varepsilon,\,\omega \to i\varepsilon_n,\, i\omega_n$. Приведем также полную сводку правил диаграммной техники в импульсном представлении для случая двухчастичного взаимодействия (ср. гл. 4).

1. На каждой диаграмме нужно расставить импульсы $\mathbf{p}$ и мацубаровские частоты ω_n так, чтобы в каждой вершине выполнялись законы сохранения энергии и импульса. При этом линии бозе-частиц должны переносить четные частоты ($\omega_n=2\pi nT$), а линии ферми-частиц — нечетные ($\omega_n=(2n+1)\pi T$).

2. Полученное выражение интегрируется по всем внутренним импульсам и суммируется по всем внутренним частотам.

3. Наконец, ответ следует умножить на

$$(-1)^{n+F}\,\frac{T^n}{(2\pi)^{3n}}, \tag{7.20}$$

где n — порядок теории возмущений, а F — число фермионных петель.

Итак, рецепт учета конечной температуры выглядит заманчиво просто. Нужно заменить энергии на $i\varepsilon_n$, интегралы по энергиям $\int \ldots d\varepsilon/2\pi$ на $T\sum_{\varepsilon_n}\ldots$ и просуммировать по дискретным частотам ε_n. Хотя на первый взгляд кажется, что выражения, полученные в мацубаровской технике при $T > 0$, должны быть как-то тривиально связаны с нуль-температурными выражениями, в действительности это не совсем так (см. задачи 40, 41).

7.2.1. Метод аналитического продолжения. Мацубаровская техника позволяет легко вычислять одновременные средние любых величин. На первый взгляд, при рассмотрении динамики в реальном времени мацубаровская техника бесполезна. Ведь разновременные средние, которые эта техника использует, имеют вид $\langle \widehat{A}(\tau)\,\widehat{B}(0)\rangle$, где τ — это мацубаровское время, а не настоящее. Однако оказывается, что при помощи специального приема, рассмотренного ниже, мацубаровская техника может быть использована для вычисления определенных *разновременных средних*.

Существуют весьма общие соотношения между мацубаровскими функциями, определенными во мнимом времени, и функциями Грина в реальном времени, такими как запаздывающие и опережающие гриновские функции. Эти соотношения следуют только из аналитических свойств функций Грина, и никак не используют конкретного вида этих функций в той или иной системе. Поэтому они имеют столь же общий характер, как, скажем, флуктуационно-диссипационная теорема или соотношения Крамерса–Кронига для восприимчивости.

Рассмотрим запаздывающую и опережающую функции Грина, определенные[1] при конечной температуре следующим образом:

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -i\int\limits_0^\infty e^{i\varepsilon t_{12}}\langle\widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\,\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2) \pm \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2)\,\widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\rangle_{\mathrm{T}}\,dt_{12}, \qquad (7.21)$$

$$G^A(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = i\int\limits_{-\infty}^0 e^{i\varepsilon t_{12}}\langle\widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\,\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2) \pm \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2)\,\widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\rangle_{\mathrm{T}}\,dt_{12}, \qquad (7.22)$$

где $t_{12} = t_1 - t_2$, причем знак «+» соответствует фермионам, а знак «−» — бозонам. Оказывается, что мацубаровская функция Грина $G_M(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, аналитически продолженная с дискретных значений частоты $\varepsilon_n > 0$ на верхней мнимой полуоси дает $G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, в то время как при продолжении с нижней полуоси, $\varepsilon_n < 0$, получается $G^A(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Принимая во внимание аналитичность $G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $G^A(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ соответственно в верхней и нижней полуплоскостях комплексного ε, соотношение между G^R, G^A и G_M можно записать так:

$$G_M(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} G^R(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) & \text{при } \varepsilon_n > 0, \\ G^A(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) & \text{при } \varepsilon_n < 0, \end{cases} \qquad (7.23)$$

[1] См. [1] § 17, формулы (17.15) и (17.16).

где мацубаровские частоты ε_n — четные для бозонов и нечетные для фермионов. Доказательство результата (7.23) приведено в задаче (40а).

Из соотношений (7.23) между запаздывающими, опережающими и мацубаровскими функциями следует весьма полезное интегральное представление:

$$G(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\varepsilon - i\varepsilon_n}\,d\varepsilon, \qquad (7.24)$$

где интеграл по $d\varepsilon$ берется по всей вещественной оси. Действительно, при $\varepsilon_n > 0$ это соотношение есть следствие аналитических свойств запаздывающей функции Грина в верхней полуплоскости. Чтобы получить $G(i\varepsilon_n)$ при $\varepsilon_n < 0$, следует заменить запаздывающую функцию Грина на опережающую функцию $G^A(\varepsilon)$ и изменить знак в (7.24). Но поскольку на вещественной оси $\operatorname{Im} G^R(\varepsilon) = -\operatorname{Im} G^A(\varepsilon)$, соотношение (7.24) оказывается справедливым и при $\varepsilon_n < 0$.

Важным применением соотношений (7.23) является задача об отыскании линейного отклика системы, возмущаемой внешним полем. Согласно формуле Кубо, функция отклика выражается через среднее от коммутатора двух операторов в разные моменты времени:

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^\infty e^{i\omega t}\,\left\langle\left[\widehat{A}(t),\ \widehat{B}(0)\right]\right\rangle_{\mathrm{T}} dt. \qquad (7.25)$$

Имеется очевидное сходство между выражением (7.25) и запаздывающей бозонной функцией Грина (7.21), означающее, что эти две функции имеют сходные аналитические свойства. Чтобы получить для функции отклика (7.25) соотношения подобные (7.23), вводится *мацубаровская восприимчивость*, определенная по отношению к мацубаровскому времени:

$$\chi^{(M)}_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2\hbar}\int\limits_{-\beta}^{\beta} \left\langle \mathrm{T}_\tau\ \widehat{A}(\tau)\,\widehat{B}(0)\right\rangle_{\mathrm{T}} e^{i\omega_n\tau}\,d\tau. \qquad (7.26)$$

Имеет место[2] так называемая *теорема об аналитическом продолжении: мацубаровская восприимчивость* $\chi^{(M)}_{AB}(i\omega_n)$, *продолженная с дискретного множества точек на положительной мнимой полуоси* $\omega = i\omega_n$ $(n > 0)$ *на вещественную ось* $\operatorname{Im}\omega = 0$, *дает восприимчивость Кубо* $\chi_{AB}(\omega)$.

Эта теорема, доказательство которой приведено в задаче 37, позволяет находить восприимчивость (7.25) с помощью функции $\chi^{(M)}_{AB}(i\omega_n)$, которую, в свою очередь, можно вычислить с помощью мацубаровской диаграммной техники.

[2] См. [1], § 17; § 37, п. 2; [6], § 91

В отсутствие взаимодействия мацубаровская восприимчивость дается всего одной диаграммой — петлей с операторами $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ в вершинах. Мацубаровская восприимчивость имеет такие же аналитические свойства, как поляризационный оператор. Напомним (см. задачу 24), что аналитические свойства восприимчивости Кубо и поляризационного оператора в нуль-температурной технике оказываются различными. А в мацубаровской технике между восприимчивостью и поляризационным оператором имеется простая связь. Согласно приведенной выше теореме, для получения восприимчивости достаточно вычислить петлю с мацубаровскими функциями Грина, и затем определенным образом продолжить ее на вещественные частоты.

Отметим, что иногда и случай $T = 0$ бывает удобнее рассматривать в мацубаровской технике. Для этого нужно вернуться от суммирования к интегрированию, поскольку при $T = 0$ точки $i\omega_n$ сливаются в мнимую ось в плоскости комплексной переменной ω. При этом $T\sum\limits_{\omega_n}\ldots$ переходит просто в $\int\ldots(d\omega/2\pi)$. При таком методе вычисления не возникает сложностей с обходом полюсов гриновских функций, поскольку направление обхода оказывается правильным автоматически.

Для иллюстрации использования мацубаровских функций при нулевой температуре, докажем теорему об аналитическом продолжении для невзаимодействующей системы. В этом случае восприимчивость дается формулой (5.4), полученной из (7.25) по теореме Вика. Рассмотрим выражение (5.4) и заменим $\omega \to i\omega$. Теперь запишем дробь в формуле (5.4) в виде интеграла по вспомогательной мнимой частоте:

$$\frac{n(E_m)-n(E_k)}{E_k-E_m-i\omega} = -\frac{1}{2\pi}\int\frac{d\varepsilon}{(i\varepsilon+\omega-E_k)(i\varepsilon-E_m)} = \\ = -\frac{1}{2\pi}\int G_k^M(i\varepsilon+i\omega)G_m^M(i\varepsilon)\,d\varepsilon, \quad (7.27)$$

Подставляя это выражение в (5.4), получаем

$$\chi_{AB}(i\omega) = -\frac{1}{2\pi}\int\mathrm{Tr}\left(\widehat{G}^M(i\varepsilon+i\omega)\widehat{B}\widehat{G}^M(i\varepsilon)\widehat{A}\right)\,d\varepsilon. \quad (7.28)$$

Возвращаясь к вещественной частоте, видим, что физическая восприимчивость (7.25) действительно получается из восприимчивости (7.28) на мнимой частоте аналитическим продолжением по ω с положительной мнимой полуоси на вещественную ось. Выражение (7.28) не зависит явно от выбора базиса. Поэтому оно оказывается весьма удобным в случаях, когда собственные функции неизвестны, как например в задаче о ферми-газе в случайном потенциале (см. гл. 9).

Подведем итог. Хотя мацубаровская техника и использует динамику во мнимом времени, иногда имеющую не вполне ясный физический смысл, она оказывается полезной при описании динамики в реальном времени как при конечной, так и при нулевой температуре. Переход от мнимого времени к физическому времени достигается аналитическим продолжением с мнимых дискретных частот на вещественные. Отметим еще раз, что мацубаровская техника позволяет изучать неравновесные явления лишь на уровне линейного отклика. Более сложные кинетические задачи, в которых внешнее поле может возбуждать систему так сильно, что она не успевает возвращаться в равновесное состояние, таким способом решать нельзя.

Существует несколько разновидностей диаграммной техники, имеющей дело со средними, взятыми не по распределению Гиббса, а по произвольному неравновесному распределению. Наиболее популярной из них является диаграммная техника Келдыша[3]. Эта техника использует запаздывающие и опережающие функции Грина, а также матрицу плотности, и описывает динамику с помощью квантового аналога кинетического уравнения. С помощью техники Келдыша можно изучать любые отклики, линейные и нелинейные, как в равновесных системах, так и в системах, выведенных из равновесия.

Однако из-за своей большой общности техника Келдыша оказывается весьма громоздкой, и использовать ее в такой простой задаче, как вычисление линейного отклика в термодинамически равновесном состоянии системы, оказывается не очень удобным. Вместо этого обычно применяют описанный в этом разделе прием, основанный на аналитическом продолжении мацубаровских величин.

Отметим здесь же, что для невзаимодействующих систем имеется возможность избежать использования мацубаровских величин. В этом случае, как мы видели в п. 5.1.1, выражение (7.25) для восприимчивости Кубо может быть преобразовано к виду (5.10), содержащему запаздывающую и опережающую функции Грина. В отличие от мацубаровской восприимчивости, однако, результат (5.10) не имеет места для взаимодействующих систем. В известном смысле, техника Келдыша позволяет обобщить формулу (5.10) на случай произвольных неравновесных систем.

Литература: Доказательство правил мацубаровской диаграммной техники приведено в [1], гл. III и [6], гл. IV. Определение временны́х (запаздывающих и опережающих) функций Грина при конечных температурах можно найти в [6], § 36 и [1], § 17. Связь между мацубаровскими, запаздывающими и опережающими функциями Грина рассмотрена в [6], § 37 и [1], § 17. Использование гриновских функций для вычисления термодинамического потенциала обсуждается в [1], § 16, § 17, п. 5.

7.3. Задачи 34–42

Задача 34. (*Затухание осцилляций.*) При конечной температуре распределение ферми-частиц по энергиям размывается на величину порядка T, что соответстует неопределенности радиуса ферми-сферы $\delta p_0 \approx T/v_F$. Пространственные осцилляции с $k = 2p_0$, имеющие место для неоднородной ферми-системы в основном состоянии соответственно видоизменяются.

[3]) Хорошее изложение техники Келдыша можно найти в обзоре: *J. Rammer, H. Smith*// Rev. Mod. Phys. 1986. V. 58(2). P. 323–359; см. также [8], § 92–95.

Рассмотрите осцилляции[4] Фриделя (см. задачу 8) (а) и Рудермана–Киттеля (см. задачу 22) (б), и получите для них выражения, верные при конечной температуре $T \ll E_F$. Покажите, что осцилляции сохраняются на расстояниях меньше *тепловой длины* $l_{\text{т}} = \hbar v_F/(2\pi T)$ и экспоненциально затухают при $r \gtrsim l_{\text{т}}$.

Задача 35. (*Термодинамический потенциал и функции Грина.*) Рассмотрим взаимодействующую ферми-систему, в которой существенными являются диаграммы типа «собственно-энергетическая часть», а более сложные диаграммы, такие например, как поправка к вершине взаимодействия, несущественны. (Подобная ситуация имеет место для электрон-фононного взаимодействия в металле.) Для нахождения термодинамического потенциала Ω в этом случае необходимо рассмотреть диаграммы, показанные на рис. 7.1. Сумма этого диаграммного ряда дает изменение термодинамического потенциала $\Omega - \Omega_0$ в результате взаимодействия.

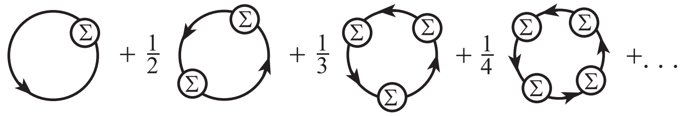

Рис. 7.1

а. Покажите, что термодинамический потенциал Ω выражается через функцию Грина

$$G_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_\alpha(\mathbf{p}) - \Sigma_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p})}, \tag{7.29}$$

где α — спиновый индекс, следующим образом:

$$\Omega = T \sum_{n,\mathbf{p},\alpha} e^{i\varepsilon_n \tau} \ln G_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p}), \;\; \tau \to +0. \tag{7.30}$$

б. (*Энтропия и теплоемкость.*) Чтобы использовать формулу (7.30) для вычисления термодинамических функций, полезно привести ее к виду, содержащему вместо суммы по мацубаровским частотам интеграл по вещественным частотам. Воспользуйтесь для этого правилом

$$T\sum_n f(\varepsilon_n) = \frac{1}{4\pi i}\oint \operatorname{th}\frac{\varepsilon}{2T}\, f(\varepsilon)\, d\varepsilon \quad (\varepsilon_n = \pi T(2n+1)) \tag{7.31}$$

и перейдите к интегрированию по контуру, обходящему мнимую ось, на которой расположены полюсы функции $\operatorname{th}(\varepsilon/2T)$.

[4] На больших расстояниях $r \gg p_0^{-1}$ удобно использовать функцию Грина в координатном представлении — см. задачу 22 и начало § 38 [1].

Найдите линейный по T член в теплоемкости[5] металла при низких температурах $T \ll \omega_D$ с учетом эффектов электрон-фононного взаимодействия. Как известно, в этом случае собственно-энергетическая часть $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ не зависит от $\mathbf{p}$ и при малых энергиях $|\varepsilon| \ll \omega_D$ с хорошей точностью дается выражением $\Sigma(\varepsilon) = -b\varepsilon$ (см. задачу 29 и [1], § 21, п. 3).

Задача 36. (*Термодинамический потенциал фермионной цепочки.*) Рассмотрим фермионную цепочку (1.20)

$$\mathscr{H} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} J_1 a_i^+ a_{i+1} + J_1 a_{i+1}^+ a_i + J_2 a_i^+ a_{i+1}^+ + J_2 a_{i+1} a_i - B a_i^+ a_i, \tag{7.32}$$

обсуждавшуюся в задачах 2 и 20. Функция Грина для этой системы была найдена в задаче 20. Используя функцию Грина, найдите термодинамический потенциал Ω.

Задача 37. (*Мацубаровская восприимчивость.*)

а. Докажите теорему об аналитическом продолжении, сформулированную в п. 7.2.1. Запишите мацубаровскую восприимчивость и восприимчивость Кубо при конечной температуре в базисе точных собственных состояний невозмущенной системы и покажите, что второе выражение получается из первого аналитическим продолжением частоты ω с дискретных значений $2\pi i n T$ на верхней мнимой полуоси $(n > 0)$ на вещественную ось (см. [1], § 17, § 37, п. 2; [6], § 91).

б. Используя теорему об аналитическом продолжении, решите снова задачу 24 б, в которой требуется найти динамическую спиновую восприимчивость идеального ферми-газа.

в. (*«Парадокс».*) Рассмотрим свободный спин $s = 1/2$ при температуре T и найдем его восприимчивость χ по отношению к слабому внешнему полю двумя различными способами: по формуле Кубо и методом аналитического продолжения. Поскольку в отсутствие внешних полей гамильтониан $\mathscr{H}_0 = 0$, в данном случае оператор спина не зависит от времени. Поэтому коммутатор в формуле Кубо обращается в нуль, $[\widehat{\mathbf{s}}_\alpha(t), \widehat{\mathbf{s}}_\alpha(t')] = 0$ и, на первый взгляд, $\chi = 0$. Покажите, что мацубаровская восприимчивость в данном случае дает закон Кюри: $\chi = \mu^2/T$, где μ — магнитный момент. Разрешите возникающий парадокс.

Задача 38. (*Флуктуации смещений решетки.*) Флуктуации смещений (6.1) атомов кристаллической решетки, возникающие вследствие нулевых колебаний и теплового движения, описываются корреляционной функцией $\langle \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r})\mathbf{u}_\beta(\mathbf{r}')\rangle_{\text{т}}$. Выразите коррелятор продольных компонент смещений

$$C_{\text{т}}(\mathbf{r}) = \langle u_\parallel(\mathbf{r}) u_\parallel(0)\rangle_{\text{т}}, \;\; u_\parallel(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\mathbf{k}|}(\mathbf{k}\mathbf{u}_{\mathbf{k}}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \tag{7.33}$$

[5] Электрон-фононное взаимодействие дает также нелинейный по температуре вклад в теплоемкость металла: $\delta C \approx (T/\omega_D)^2 \ln(\omega_D/T)$ — см. [1], § 21, п. 4.

через температурную функцию Грина фононов $D(i\omega_n, \mathbf{k})$ (см. (7.15), (7.19)), и получите для $C_{\text{т}}(\mathbf{r})$ общую формулу, справедливую при произвольном законе дисперсии фононов.

Найдите коррелятор смещений $C_{\text{т}}(\mathbf{r})$ для однородной изотропной упругой среды в размерностях $D = 1, 2, 3$, считая закон дисперсии фононов линейным. Рассмотрите $C_{\text{т}}(\mathbf{r})$ при $T \neq 0$ и $T = 0$, выделяя $\Delta C_{\text{т}}(\mathbf{r}) = C_{\text{т}}(\mathbf{r}) - C_0(\mathbf{r})$. Найдите по порядку величины зависимость $C_0(\mathbf{r})$ и $\Delta C_{\text{т}}(\mathbf{r})$ от T и $\mathbf{r}$ при $T \to 0$, $r \to \infty$. Определите способ обрезания интегралов, расходящихся инфракрасно (на больших расстояниях) и ультрафиолетово (на малых расстояниях).

Задача 39. (*Переход Пайерлса: критическая температура и флуктуации.*) Вернемся к задаче 32, где изучалась пайерлсовская неустойчивость одномерного ферми-газа, возникающая вследствие электрон-фононного взаимодействия. Рассмотрим температурную функцию Грина фононов $D(i\omega_n, k)$ с учетом электрон-фононного взаимодействия.

а. Найдите поляризационный оператор $\Pi(i\omega_n, k)$ при $|k| \approx 2p_0$ и $T \ll E_F$. Рассмотрите корреляционную функцию фурье-компонент смещений:

$$C_{\text{т}}(k) = \langle u_k(t)\, u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}} \tag{7.34}$$

при k близких к $\pm 2p_0$. Найдите температуру T_c, при которой $C_{\text{т}}(k) \to \infty$.

б. Вблизи температуры перехода $T = T_c$ спектр фононов «смягчается». Из-за этого возрастают тепловые флуктуации гармоник поля смещений $u(r,t)$ с $|k| \approx 2p_0$. Интересующую нас часть поля с k вблизи $\pm 2p_0$ можно записать в виде:

$$u(r,t) = \operatorname{Re}\left(Q(r,t)\, e^{2ip_0 r}\right) \tag{7.35}$$

где $Q(r,t)$ — плавно зависящая от координат функция. Покажите, что при T немного выше T_c спектр флуктуаций $Q(r,t)$ имеет лоренцев вид

$$\langle Q_k(t) Q_{-k}(t)\rangle = \frac{A}{ak^2 + \tau},\ \tau \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \ll 1,\ |k| \ll \frac{T_c}{v_F}. \tag{7.36}$$

Найдите пространственную зависимость коррелятора смещений $C_{\text{т}}(r)$, определенного выражением (7.33). Обратите внимание, что при выделении в выражении для $C_{\text{т}}(r)$ сильно флуктуирующей части, из всей суммы по $\omega_n = 2\pi n T$ остается только член с $n = 0$. Это соответствует переходу к классической термодинамике.

Выражение (7.36) называют *законом Орнштейна–Цернике*. Оно описывает корреляционную функцию параметра порядка вблизи T_c в теории среднего поля для любого фазового перехода.

Задача 40. (*Связь между запаздывающими, опережающими и мацубаровскими функциями.*)

а. Докажите соотношения (7.23), связывающие мацубаровскую функцию на верхней (нижней) мнимой полуоси с аналитическим продолжением запаздывающей (опережающей) функции Грина с вещественной оси в соответствующую полуплоскость комплексной частоты.

б. Существует весьма полезный метод вычисления мацубаровских диаграмм, опирающийся на аналитические свойства функций Грина[6]. С помощью этого метода можно «автоматизировать» процедуру аналитического продолжения, необходимую для перехода от мацубаровских к запаздывающим и опережающим функциям. Кроме того, он позволяет выполнить в явном виде суммирование по мацубаровским частотам в любой диаграмме.

В качестве примера рассмотрим собственно-энергетическую часть $\Sigma(i\varepsilon_n, \mathbf{p})$ мацубаровской функции Грина электрона, взаимодействующего с фононами:

$$\Sigma(i\varepsilon_n, \mathbf{p}) = -g^2 T \sum_{i\varepsilon'_m} \int G(i\varepsilon'_m, \mathbf{p}_1) D(i\varepsilon_n - i\varepsilon'_m, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3}. \tag{7.37}$$

Соответствующая диаграмма изображена на рис. 4.10.

Выполните суммирование в (7.37) в общем виде, пользуясь аналитическими свойствами гриновских функций (7.23), (7.24). Получите формулу[7]

$$\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2}{2\pi^2} \int \frac{d^3\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \left(\operatorname{th}\frac{\varepsilon'}{2T} + \operatorname{cth}\frac{\omega}{2T}\right) \times \\ \times \frac{\operatorname{Im} G^R(\varepsilon', \mathbf{p}_1) \operatorname{Im} D^R(\omega, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{\varepsilon - \varepsilon' - \omega + i0} d\varepsilon', \tag{7.38}$$

где интеграл берется по вещественным ε' и ω. Выражение (7.38) по своей структуре напоминает полученные в задаче 24б формулы (5.57), (5.53), дающие восприимчивость при $T = 0$ и явно учитывающие аналитические свойства, следующие из принципа причинности.

Задача 41. (*Динамика вблизи перехода.*) Рассмотрим динамику электронов и фононов в одномерной системе при температуре вблизи перехода Пайерлса. Будем считать, что T несколько выше T_c. При этом, как мы выяснили в задаче 39, в системе имеются сильные флуктуации поля смещений решетки с k вблизи $\pm 2p_0$. Естественно ожидать, что динамика фононов с такими k является *медленной*.

а. Найдите запаздывающую функцию Грина фононов, используя выражение для мацубаровской функции Грина, найденное в задаче 39.

б. Найдите запаздывающую функцию Грина электронов, описывающую эффект рассеяния электронов на флуктуациях поля смещений вблизи T_c. Считайте рассеяние слабым и найдите собственно-

---

[6] См. работу: *Г. М. Элиашберг*// ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1437, а также [1], § 21, п. 3; [6], § 96.

[7] Мнимая часть функций Грина в (7.38) определена стандартным образом. В частности, для свободных частиц $\operatorname{Im}(\varepsilon - \xi + i0)^{-1} = -\pi\delta(\varepsilon - \xi)$.

энергетическую часть (7.38) во втором порядке по взаимодействию с «мягкими» фононами, функция Грина которых получена в а.

Задача 42*. (*Взаимодействие ван-дер-Ваальса при $T>0$.*) Рассмотрим два атома на расстоянии r друг от друга. При r много большем размера атомов $a_B=\hbar^2/me^2$ обменное взаимодействие, обязанное своим существованием туннелированию электронов, становится экспоненциально малым, и основным является *ван-дер-ваальсово взаимодействие*, возникающее благодаря флуктуациям электромагнитного поля. Потенциал этого взаимодействия, как при нулевой, так и при конечной тамппературе, можно выразить через поляризуемости атомов.

Предположим, что область пространства, в которой находятся два атома, заполнена равновесным излучением с температурой T. На каждый из атомов со всех сторон падает свет и, рассеиваясь, оказывает давление. Для одного атома силы давления компенсируются, поскольку распределение излучения по углам изотропно. Если же имеется второй атом, то он экранирует часть излучения, падающего на первый атом, и появляется результирующая сила притяжения[8].

Выразите эту силу через поляризуемости атомов, считая их основные состояния изотропными, т. е. характеризующимися орбитальным угловым моментом $L=0$. Используйте температурные гриновские функции фотонов $D_{\alpha\beta}(r_1,r_2,\tau_1-\tau_2)=-\langle \mathrm{T}_\tau A_\alpha(r_1,\tau_1)A_\beta(r_2,\tau_2)\rangle_{\mathrm{т}}$ в кулоновской калибровке $A_0=\Phi=0$. В мацубаровском фурье-представлении они имеют вид

$$D_{\alpha\beta}(i\omega_n,k)=-\frac{4\pi\hbar}{\omega_n^2/c^2+k^2}\left(\delta_{\alpha\beta}+\frac{c^2k_\alpha k_\beta}{\omega_n^2}\right) \tag{7.39}$$

(см. [1], § 28, формула (28.27 б); [6], § 79)

Ван-дер-ваальсово взаимодействие есть частный случай так называемой *корреляционной* энергии системы, состоящей из двух или большего числа взаимодействующих подсистем. Корреляционная энергия, найденная в низшем неисчезающем порядке по взаимодействию, всегда отрицательна, поскольку она представляет собой поправку к энергии основного состояния второго порядка по взаимодействию. Другой пример системы, в которой корреляционная энергия играет важную роль — электронная ферми-жидкость (см. задачи 48 б и 49).

7.4. Решения задач 34–42

34 а. Будем решать эту задачу по аналогии с задачей 8. Рассмотрим мацубаровскую функцию Грина

$$G(\tau,x,x')=-\langle \mathrm{T}_\tau\,\psi(x,0)\,\psi^+(x',\tau)\rangle_{\mathrm{т}} \tag{7.40}$$

[8] Если бы вместо атомов в пространстве, заполненном излучением, находились два одинаковых макроскопических поглощающих шара, то сила притяжения между ними спадала бы как $1/r^2$. Это справедливо при диаметре шаров $a\ll r\ll Ta^2/c\hbar$. В XVIII в. подобный механизм предлагался для объяснения закона тяготения.

и запишем плотность частиц $n(x)$ в виде

$$n(x)=2\lim_{\tau\to-0}G(\tau,x,x) \tag{7.41}$$

(множитель 2 учитывает спин). Как и в задаче 8, функция Грина при наличии стенки получается методом изображений:

$$G(\tau,x,x')=G_0(\tau,x,x')-G_0(\tau,x,-x'), \tag{7.42}$$

где $G_0(\tau,x,x')$ — гриновская функция ферми-газа на прямой $-\infty<x<\infty$. Отсюда получается такое выражение для плотности частиц:

$$n(x)=2\Big(G_0(\tau=-0,\ x=0)-G_0(\tau=-0,\ 2x)\Big). \tag{7.43}$$

Чтобы найти $G_0(\tau,x)$, вспомним, что ее фурье-образ есть $G_0(i\omega_n,\,p)=1/(i\omega_n-\xi_p)$. Поэтому

$$G_0(\tau,x)=T\sum_{\omega_n}\int\frac{e^{ipx-i\omega_n\tau}}{i\omega_n-\xi_p}\,\frac{dp}{2\pi}. \tag{7.44}$$

Перейдем в (7.44) к интегрированию по ξ, выделяя области импульсов $p\approx\pm p_0$:

$$G_0(\tau,x)=\frac{T}{2\pi v_F}\sum_{\omega_n}e^{-i\omega_n\tau}\left(e^{ip_0x}\int\frac{e^{i\xi x/v_F}}{i\omega_n-\xi}d\xi\,+\,e^{-ip_0x}\int\frac{e^{-i\xi x/v_F}}{i\omega_n-\xi}d\xi\right) \tag{7.45}$$

Рассмотрим следующее выражение:

$$I(\tau,x)=\sum_{\omega_n}e^{-i\omega_n\tau}\int\frac{e^{i\xi x/v_F}}{i\omega_n-\xi}d\xi. \tag{7.46}$$

Вычислим $I(\tau,x)$ при $x>0$. Замыкая контур интегрирования по ξ в верхней полуплоскости, получаем

$$I(\tau,x)=-2\pi i\sum_{\omega_n>0}e^{-\omega_n(x+iv_F\tau)/v_F}=\frac{-\pi i}{\mathrm{sh}(\pi T(x/v_F+i\tau))}. \tag{7.47}$$

Нетрудно показать, что выражение (7.47) справедливо и при $x<0$. В результате

$$G_0(\tau,x)=-i\frac{T}{2v_F}\left(\frac{e^{ip_0x}}{\mathrm{sh}\,(\pi T(x/v_F+i\tau))}-\frac{e^{-ip_0x}}{\mathrm{sh}\,(\pi T(x/v_F-i\tau))}\right), \tag{7.48}$$

откуда

$$G_0(\tau\to-0,\ x)=\frac{T\sin p_0x}{v_F\ \mathrm{sh}\,(\pi Tx/v_F)}. \tag{7.49}$$

Теперь, пользуясь (7.43), можно найти плотность частиц:

$$n(x)=\frac{2T}{v_F}\left(\frac{v_F\,p_0}{\pi T}-\frac{\sin\,(2p_0x)}{\mathrm{sh}\,(2\pi Tx/v_F)}\right)=n_0\left(1-\frac{\pi T\ \sin\,(2p_0x)}{v_Fp_0\ \mathrm{sh}\,(2\pi Tx/v_F)}\right), \tag{7.50}$$

где $n_0 = 2p_0/\pi$ — плотность газа вдали от стенки. При $T \to 0$ это выражение, очевидно, воспроизводит ответ задачи 8. Заметим также, что при $x \gg v_F/2\pi T$ осцилляции экспоненциально затухают. Характерное число осцилляций $N \approx p_0 v_F/\pi T$ велико при температурах, много меньших энергии Ферми.

34б. Эффект Рудермана–Киттеля рассмотрим по аналогии с задачей 23. В первую очередь нам понадобится мацубаровская функция Грина в координатно-энергетическом представлении. Вычислим ее, как в задаче 22:

$$G(i\omega_n,\, \mathbf{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{pr}}}{i\omega_n - \xi_p} = \frac{\nu_0}{pr}\int \frac{\sin[(p_0+\xi/v_F)r]}{i\omega_n - \xi}\,d\xi =$$

$$= \frac{\nu_0}{2ipr}\int \frac{e^{i(p_0+\xi/v_F)r} - e^{-i(p_0+\xi/v_F)r}}{i\omega_n - \xi}\,d\xi = -\frac{m}{2\pi r}e^{ir(p_0+i\omega_n/v_F)\operatorname{sgn}\omega_n}. \tag{7.51}$$

Точно так же, как и в задаче 23, выразим плотность спина через функцию Грина. Все выкладки отличаются лишь заменой $-i$ на -1 в определениях функций Грина и в операторе возмущения. Поэтому

$$\sigma^i(r) = 2JS^i\,T\sum_{\omega_n} G_0^2(i\omega_n, r), \tag{7.52}$$

что приводит к

$$\sigma_i(r) = 2JS_iT\left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2\left(\sum_{\omega_n>0} e^{2ip_0r-2\omega_n r/v_F} + \sum_{\omega_n<0} e^{-2ip_0r+2\omega_n r/v_F}\right). \tag{7.53}$$

Выполняя суммирование по ω_n, получаем

$$\sigma^i(r) = JS^i\,\frac{m^2T}{2\pi^2r^2}\,\frac{\cos(2p_0r)}{\operatorname{sh}(2\pi Tr/v_F)}. \tag{7.54}$$

При $T \to 0$ это выражение переходит в полученное ранее. Длина, на которой затухают осцилляции, оказывается равной $v_F/(2\pi T)$, как и для фриделевских осцилляций (7.50).

35а. Как известно, суммирование ряда для термодинамического потенциала осложняется тем, что по сравнению с рядом для функции Грина каждая из диаграмм содержит дополнительный множитель $1/n$, где n — порядок диаграммы по взаимодействию. Канонический способ преодоления этой трудности — дифференцирование диаграмм по константе связи, устраняющее множители $1/n$. В случае же диаграмм, изображенных на рис. 7.1, в использовании подобного приема нет необходимости, поскольку имеющийся ряд легко суммируется. Действительно, n-й член ряда представляет собой замкнутую петлю из n функций $G_{0,\alpha}(i\varepsilon_n, \mathbf{p})$ и n функций $\Sigma_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p})$. Его вклад в термодинамический потенциал есть

$$\delta\Omega_n = \frac{1}{n}\,T\sum_{m,\mathbf{p},\alpha}\left(G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m,\mathbf{p})\Sigma_\alpha(i\varepsilon_m,\mathbf{p})\right)^n. \tag{7.55}$$

Сумма этих вкладов есть не что иное как

$$\Omega - \Omega_0 = -T\sum_{m,\mathbf{p},\alpha}\ln\left(1 - G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m,\mathbf{p})\Sigma_\alpha(i\varepsilon_m,\mathbf{p})\right) = \\ = T\sum_{m,\mathbf{p},\alpha}\ln\frac{G_\alpha(i\varepsilon_m,\mathbf{p})}{G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m,\mathbf{p})}. \tag{7.56}$$

С другой стороны, можно проверить, что для свободных фермионов

$$\Omega_0 = T\sum_{m,\mathbf{p},\alpha} e^{i\varepsilon_m\tau}\ln\left(G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m,\mathbf{p})\right), \quad \tau \to +0. \tag{7.57}$$

Чтобы доказать соотношение (7.57), рассмотрим выражение

$$F(a) = -T\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\varepsilon_m\tau}\ln\left(i\varepsilon_m - a\right), \tag{7.58}$$

где $\varepsilon_m = \pi T(2m+1)$, $\tau \to +0$. Дифференцируя это выражение по a, получаем

$$F'(a) = -T\sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{e^{i\varepsilon_m\tau}}{a - i\varepsilon_m} = \frac{1}{e^{\beta a}+1}. \tag{7.59}$$

В справедливости последнего равенства можно убедиться, заметив, что полюсы выражения $1/(e^{\beta a}+1)$ и вычеты в них совпадают с полюсами и вычетами выражения под знаком суммы в (7.59). Это условие определяет зависимость F' от a с точностью до неизвестной целой функции a. Чтобы найти эту целую функцию (и убедиться в том, что она равна нулю) можно рассмотреть выражение (7.59) при больших $\operatorname{Re} a$. В пределе $|\operatorname{Re} a| \gg T$ сумму в (7.59) можно заменить интегралом

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty}\frac{e^{z\tau}}{z-a}dz = \begin{cases}1 & \text{при } \operatorname{Re} a < 0,\\ 0 & \text{при } \operatorname{Re} a > 0.\end{cases} \tag{7.60}$$

Получающаяся зависимость от a совпадает с асимптотикой выражения $-(e^{\beta a}+1)^{-1}$.

Зная $F'(a)$, нетрудно найти $F(a)$ прямым интегрированием:

$$F(a) = -\int_{\xi}^{\infty}\frac{1}{e^{\beta a}+1}da = T\int_{e^{-\beta\xi}}^{0}\frac{1}{1+e^{-\beta a}}de^{-\beta a} = -T\ln(1+e^{-\beta\xi}). \tag{7.61}$$

Данное выражение есть не что иное, как термодинамический потенциал одного фермиона с энергией ξ. Отсюда требуемое соотношение (7.57) получается суммированием по состояниям всех фермионов системы.

35б. Рассмотрим общее выражение (7.30) для термодинамического потенциала и, не конкретизируя пока вид функции Грина, преобразуем это выражение к форме, удобной для вычисления термодинамических функций. Представим сумму по $\varepsilon_m = \pi T(2m+1)$ в виде контурного интеграла:

$$\Omega = \sum_{\mathbf{p},\alpha}\left(\int\limits_{C_1} + \int\limits_{C_2}\right) \operatorname{th}\frac{z}{2T}\ \ln G_\alpha(z,\mathbf{p})e^{z\tau}\,\frac{dz}{4\pi i}, \tag{7.62}$$

где контуры C_1 и C_2 охватывают верхнюю и нижнюю мнимые полуоси $\operatorname{Im} z > 0$ и $\operatorname{Im} z < 0$, как показано на рис. 7.2.

Найдем энтропию $S = -\partial\Omega/\partial T$, дифференцируя интеграл (7.62) по параметру T:

$$S = \sum_{\mathbf{p},\alpha}\left(\int\limits_{C_1} + \int\limits_{C_2}\right)\frac{z}{2T^2\operatorname{ch}^2(z/2T)}\ \ln G_\alpha(z,\mathbf{p})e^{z\tau}\,\frac{dz}{4\pi i}, \tag{7.63}$$

где $G_\alpha(z,\mathbf{p})$ есть аналитическое продолжение мацубаровской функции Грина с положительной и отрицательной мнимой полуоси соответственно в области $\operatorname{Im} z > 0$ и $\operatorname{Im} z < 0$.

Выражение (7.63) весьма удобно для вычислений, поскольку функция $1/\operatorname{ch}^2(z/2T)$ эспоненциально быстро убывает при удалении z от мнимой оси. Это обстоятельство позволяет развернуть контуры, направив их вдоль вещественной оси, как показано на рис. 7.2. В получившемся выражении можно пренебречь множителем $e^{z\tau}$, поскольку функция $1/\operatorname{ch}^2(z/2T)$ обеспечивает сходимость интеграла по z.

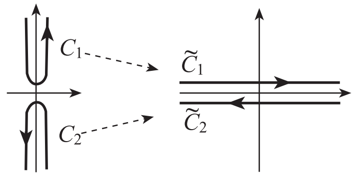

Рис. 7.2

Заметим теперь, что аналитическое продолжение мацубаровской функции в области $\operatorname{Im} z > 0$ дает запаздывающую функцию $G^R(z,\mathbf{p})$, а в области $\operatorname{Im} z < 0$ — опережающую функцию $G^A(z,\mathbf{p})$ (см. задачу 40). Поэтому интеграл по контурам $\widetilde{C}_1$ и $\widetilde{C}_2$ можно представить в виде интеграла по вещественным z от выражения, содержащего разность $\ln G^R(z,\mathbf{p}) - \ln G^A(z,\mathbf{p})$. Это дает следующую полезную формулу:

$$S = \sum_{\mathbf{p},\alpha}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{2T^2\operatorname{ch}^2(\varepsilon/2T)}\ \ln\frac{G^R_\alpha(\varepsilon,\mathbf{p})}{G^A_\alpha(\varepsilon,\mathbf{p})}\,\frac{d\varepsilon}{4\pi i}. \tag{7.64}$$

Отметим, что при вещественном ε величины $G^R_\alpha(\varepsilon,\mathbf{p})$ и $G^A_\alpha(\varepsilon,\mathbf{p})$ комплексно сопряжены, и значит выражение в скобках в (7.64) есть не что иное, как $2i\arg G^R_\alpha(\varepsilon,\mathbf{p})$. Поэтому выражение (7.64) можно переписать так:

$$S = \sum_{\mathbf{p},\alpha}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{2T^2\operatorname{ch}^2(\varepsilon/2T)}\arg G^R_\alpha(\varepsilon,\mathbf{p})\,\frac{d\varepsilon}{2\pi}. \tag{7.65}$$

Рассмотрим теперь функцию Грина электронов, в которую включена собственно-энергетическая часть, описывающая взаимодействие с фононами. Как было выяснено в задаче 29, в данном случае собственно-энергетическая часть практически не зависит от импульса, являясь функцией одной лишь энергии. Запаздывающая функция Грина в этом случае есть $G^R(\varepsilon,\mathbf{p}) = (\varepsilon - \Sigma(\varepsilon) - \xi(\mathbf{p}) + i0)^{-1}$. Считая для простоты $\Sigma(\varepsilon)$ вещественным, получаем

$$\arg G^R(\varepsilon,\mathbf{p}) = \begin{cases} -\pi & \text{при } \xi(\mathbf{p}) > \varepsilon - \Sigma(\varepsilon),\\ 0 & \text{при } \xi(\mathbf{p}) < \varepsilon - \Sigma(\varepsilon).\end{cases} \tag{7.66}$$

Просуммируем теперь (7.66) по ипульсам и проекциям спина. Поскольку нас интересует вклад от состояний с энергиями вблизи E_F, перейдем к интегрированию по ξ в конечных пределах $-\xi_0 < \xi < \xi_0$, где $\xi_0 \approx E_F$. Вычисляем интеграл:

$$\sum_{\mathbf{p},\alpha}\arg G^R(\varepsilon,\mathbf{p}) = -2\pi\nu_0\int\limits_{-\xi_0}^{\xi_0}\theta\left(\xi - \varepsilon + \Sigma(\varepsilon)\right)\,d\xi = 2\pi\nu_0\left(\varepsilon - \Sigma(\varepsilon) - \xi_0\right). \tag{7.67}$$

Множитель 2 возникает в результате суммирования по спинам. Подставим это выражение в (7.65) и заметим, что слагаемое $-2\pi\nu_0\xi_0$ приводит к интегралу по ε от нечетной функции, равному нулю. В результате получаем независящее от параметра обрезки ξ_0 окончательное выражение:

$$S = \nu_0\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon\left(\varepsilon - \Sigma(\varepsilon)\right)}{2T^2\operatorname{ch}^2(\varepsilon/2T)}\,d\varepsilon. \tag{7.68}$$

Подставляя в (7.68) собственно-энергетическую часть в виде $\Sigma(\varepsilon) = -b\varepsilon$, находим

$$S = (1+b)\nu_0 T\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2}{2\operatorname{ch}^2(x/2)}dx = 4\zeta(2)(1+b)\nu_0 T, \tag{7.69}$$

где $\zeta(2) = \pi^2/6$. Отсюда теплоемкость $C = T\partial S/\partial T = (1+b)C_0(T)$, где $C_0 = (2\pi^2/3)\nu_0 T$ — теплоемкость идеального ферми-газа.

Приведенное вычисление нетрудно обобщить на случай ферми-системы с произвольным взаимодействием, не разрушающим ферми-жидкостную картину. В этом случае при малых ε и ξ собственно-энергетическая часть имеет вид $\Sigma(\varepsilon,\xi) = a\xi - b\varepsilon$. Как нетрудно видеть, при этом формула (7.65) приводит к линейной по T энтропии и равной ей теплоемкости $C(T) = [(1+b)/(1+a)]C_0(T)$. Отметим, что та же самая константа дает перенормировку эффективной массы: $m_*/m = (1+b)/(1+a)$.

36. Как и в задаче 20, будем использовать представление гамильтониана фермионной цепочки (1.20)) в виде суммы $\mathscr{H}_0$ и $\mathscr{H}_{\text{int}}$, где

$\mathscr{H}_0$ содержит все члены, сохраняющие число фермионов, а $\mathscr{H}_{\rm int}$ — все члены, меняющие число ферминов на ± 2. Графическое представление функций Грина, получающихся в этом представлении, было найдено в задаче 20. Соответствующая последовательность диаграмм для термодинамического потенциала показана на рис. 7.3.

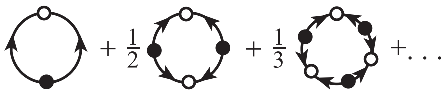

Рис. 7.3

Выражение, соответствующее n-му члену последовательности есть

$$\delta\Omega_n = \frac{1}{n}\,T\sum_{\varepsilon_m}\int\limits_0^\pi \left((2iJ_2\sin q)^2 G_0(i\varepsilon_m,p)G_0(-i\varepsilon_m,-p)\right)^n \frac{dp}{2\pi}. \qquad (7.70)$$

Суммируя по $n = 1, 2, \ldots$, получаем изменение потенциала вследствие присутствия «взаимодействия» $\mathscr{H}_{\rm int}$:

$$\Omega - \Omega_0 = -T\sum_{\varepsilon_m}\int\limits_0^\pi \ln\left(1-(2iJ_2\sin q)^2 G_0(i\varepsilon_m,p)G_0(-i\varepsilon_m,-p)\right)\frac{dp}{2\pi} =$$
$$= -T\sum_{\varepsilon_m}\int\limits_0^\pi \ln\left(\frac{\varepsilon_m^2+4(J_1\cos p-B)^2+4J_2^2\sin^2 p}{\varepsilon_m^2+4(J_1\cos p-B)^2}\right)\frac{dp}{2\pi}. \qquad (7.71)$$

Пользуясь соотношениями (7.57) и (7.61), полученными в задаче 35, находим

$$\Omega - \Omega_0 = -2T\int\limits_0^\pi \ln\left(\frac{\operatorname{ch}\beta\sqrt{(J_1\cos p-B)^2+J_2^2\sin^2 p}}{\operatorname{ch}\beta(J_1\cos p-B)}\right)\frac{dp}{2\pi}. \qquad (7.72)$$

Отделяя вклад Ω_0, получаем искомое выражение для термодинамического потенциала:

$$\Omega = -\frac{T}{\pi}\int\limits_0^\pi \ln\left(2\operatorname{ch}\beta\sqrt{(J_1\cos p-B)^2+J_2^2\sin^2 p}\right)dp. \qquad (7.73)$$

37 а. Докажем, что аналитическое продолжение мацубаровской восприимчивости (7.26) дает восприимчивость Кубо (7.25). Запишем формальные выражения для обеих восприимчивостей в базисе точных собственных состояний $|n\rangle$ рассматриваемой системы: $\widehat{\mathscr{H}}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Во избежание недоразумений заметим, что речь идет о многочастичных, а не об одночастичных состояниях.

Рассмотрим сначала восприимчивость Кубо:

$$\chi_{AB}(\omega) = i\int\limits_0^\infty e^{i\omega t}\langle[\widehat{A}(t)\widehat{B}(0)]\rangle_{\rm т}dt, \qquad (7.74)$$

где $\langle\ldots\rangle_{\rm т} = \operatorname{Tr}(e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}}\ldots)/\operatorname{Tr}e^{-\beta\widehat{\mathscr{H}}}$ — усреднение по распределению Гиббса, а $\widehat{X}(t) = e^{-it\widehat{\mathscr{H}}}\,\widehat{X}\,e^{it\widehat{\mathscr{H}}}$ — оператор в представлении Гейзенберга. Переходя к базису собственных состояний гамильтониана $\mathscr{H}$, получаем

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{Z}\int\limits_0^\infty e^{i\omega t}\sum_{m,n}e^{-\beta E_n}\Big(e^{-i\omega_{nm}t}\langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle -$$
$$- e^{i\omega_{nm}t}\langle n|\widehat{B}|m\rangle\langle m|\widehat{A}|n\rangle\Big)\,dt, \qquad (7.75)$$

где $\omega_{nm} = E_n - E_m$ — частота перехода, а $Z = \operatorname{Tr}\exp(-\beta\widehat{\mathscr{H}})$ — статистическая сумма. Меняя индексы m и n во втором члене суммы местами и интегрируя по t, находим

$$\chi_{AB}(\omega) = \sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{\omega-\omega_{nm}+i0}\,\langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle. \qquad (7.76)$$

Мнимая часть $i0$ возникает из-за множителя $\exp(-\delta t)$, который надо добавить в формально расходящийся интеграл по t для обеспечения его сходимости.

Теперь проделаем аналогичное вычисление для мацубаровской корреляционной функции

$$\chi^M_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2}\int\limits_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_n\tau}\langle {\rm T}_\tau\,\widehat{A}^M(\tau)\,\widehat{B}^M(0)\rangle_{\rm т}\,d\tau. \qquad (7.77)$$

Здесь $\widehat{X}^M(\tau) = e^{-\tau\widehat{\mathscr{H}}}\,\widehat{X}\,e^{\tau\widehat{\mathscr{H}}}$ — мацубаровский оператор. В базисе собственных состояний получаем

$$\chi^M_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2Z}\int\limits_0^\beta e^{i\omega_n\tau}\mathrm{X}\sum_{m,n}e^{-\beta E_n}e^{-\omega_{nm}\tau}\langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle\,d\tau +$$
$$+\frac{1}{2Z}\int\limits_{-\beta}^0 e^{i\omega_n\tau}\sum_{m,n}e^{-\beta E_n}e^{\omega_{nm}\tau}\langle n|\widehat{B}|m\rangle\langle m|\widehat{A}|n\rangle\,d\tau. \qquad (7.78)$$

Снова переставляем индексы во второй сумме и вычисляем интеграл по τ (при этом полезно учесть, что $\omega_n\beta = 2\pi n$):

$$\chi^M_{AB}(i\omega_n) = \sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{i\omega_n-\omega_{nm}}\,\langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle. \qquad (7.79)$$

Доказательство интересующего нас утверждения получается из сравнения (7.76) и (7.79). Вспомним, что восприимчивость $\chi_{AB}(\omega)$ — аналитическая в верхней полуплоскости функция ω (это следует из того, что она есть фурье-преобразование функции, отличной от 0 лишь при $t > 0$). Значит, ее можно продолжить с вещественной оси на положительную мнимую полуось $\operatorname{Im}\omega > 0$. При этом, согласно (7.76) и (7.79), в точках $i\omega_n = 2\pi i n T$, $n > 0$, оба выражения совпадают.

Теперь предположим, что существует аналитическое продолжение $\chi^M_{AB}(i\omega_n)$ с верхней мнимой полуоси на всю верхнюю полуплоскость ω. Тогда это аналитическое продолжение должно совпасть с $\chi_{AB}(\omega)$, поскольку, согласно теореме теории функций комплексного переменного, две функции, аналитические в некоторой области и совпадающие на бесконечном множестве точек, имеющем предельную точку, совпадают во всей области.

37б. Найдем динамическую спиновую восприимчивость ферми-газа при $T \ll E_F$. В задаче 24б эта величина была найдена непосредственным усреднением операторов в формуле Кубо. Чтобы решить задачу с помощью мацубаровской техники мы вычислим мацубаровскую восприимчивость. Поскольку $\chi^M_{\alpha\beta}(i\omega_n,\, k)$ — хронологически упорядоченная величина (по отношению к мнимому времени), ее можно вычислять как петлю, составленную из мацубаровских функций Грина:

$$\chi^M_{\alpha\beta}(i\omega_n,\, k) = -2\mu_B^2\delta_{\alpha\beta}\, T\sum_{\omega_m}\int G(i\omega_m,\, \mathbf{p})\, G(i\omega_m + i\omega_n,\, \mathbf{p}+\mathbf{k})\,\frac{d^3p}{(2\pi)^3}. \tag{7.80}$$

Вычислим мацубаровскую сумму

$$T\sum_{\omega_m,\mathbf{p}}\frac{1}{(i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k})\,(i\omega_m - \xi_p)}, \tag{7.81}$$

разлагая произведение на простейшие дроби:

$$\sum_{\omega_m}\frac{1}{(i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k})\,(i\omega_m - \xi_p)} = \\ = \sum_{\omega_m}\frac{1}{i\omega_n - \xi_{p+k} + \xi_p}\left(\frac{1}{i\omega_m - \xi_p} - \frac{1}{i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k}}\right).$$

Заметим, что поскольку $\omega_m = (2m+1)\pi T$ и $\omega_n = 2\pi n T$, во втором члене в скобках можно сделать сдвиг переменной суммирования $m \to m - n$, при котором из него исчезает ω_n. В каждом из слагаемых в скобках вещественная часть суммы сходится, а мнимая формально расходится. Однако она нечетна по m, и потому сокращается при приведении членов с противоположными m. Остается найти сумму вида

$$S(\xi) = T\sum_{\omega_m}\frac{\xi}{\omega_m^2 + \xi^2}, \tag{7.82}$$

что нетрудно сделать с помощью известного соотношения

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)^2 + a^2} = \frac{\pi}{2a}\,\operatorname{th}\frac{\pi a}{2}. \tag{7.83}$$

Поэтому интересующая нас сумма есть

$$S(\xi) = \frac{1}{2}\operatorname{th}\frac{\beta\xi}{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{e^{\beta\xi}+1} \equiv \frac{1}{2} - n_F(\xi), \tag{7.84}$$

где $n_F(\xi)$ — ферми-распределение. Возвращаясь к выражению (7.81), мы получаем весьма полезное тождество

$$T\sum_{\omega_m}\frac{1}{(i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k})\,(i\omega_m - \xi_p)} = \frac{n_F(\xi_{p+k}) - n_F(\xi_p)}{i\omega_n - \xi_{p+k} + \xi_p}, \tag{7.85}$$

которое часто используется при вычислении поляризационных операторов и восприимчивостей ферми-газа.

Используя соотношение (7.85), запишем мацубаровскую восприимчивость так:

$$\chi^M(i\omega,\, k) = 2\mu_B^2\delta_{\alpha\beta}\int\frac{n_F(\xi_p) - n_F(\xi_{p+k})}{i\omega_n - \xi_{p+k} + \xi_p}\,\frac{d^3p}{(2\pi)^3}. \tag{7.86}$$

Поскольку нас интересуют достаточно малые $T \ll E_F$ и $|\mathbf{k}| \ll p_0$, перейдем к интегрированию по ξ. Так как $\int(n_F(\xi) - n_F(\xi + \mathbf{vk}))d\xi = \mathbf{vk}$ (независимо от величины T), получаем

$$\chi^M(i\omega_n,\, k) = 2\mu_B^2\nu_0\int\frac{\mathbf{k}\mathbf{v}_F}{i\omega_n - \mathbf{k}\mathbf{v}_F}\,\frac{do}{4\pi}. \tag{7.87}$$

Вычисляя интеграл по телесному углу так же, как в задаче 24б, находим следующее выражение:

$$\chi^M_{\alpha\beta}(i\omega_n,\, k) = 2\mu_B^2\nu_0\delta_{\alpha\beta}\left(1 + \frac{i\omega_n}{2kv_F}\ln\frac{i\omega_n - kv_F}{i\omega_n + kv_F}\right). \tag{7.88}$$

Для того чтобы аналитически продолжить (7.88) на вещественную ось, достаточно сделать замену $i\omega_n \to \omega + i0$. В результате получается

$$\chi(\omega,\, k) = 2\mu_B^2\nu_0\left(1 + \frac{\omega}{2kv_F}\ln\frac{\omega - kv_F + i0}{\omega + kv_F + i0}\right). \tag{7.89}$$

Отделяя вещественную и мнимую части, находим

$$\operatorname{Re}\chi(\omega,\, k) = 2\mu_B^2\nu_0\left(1 + \frac{\omega}{2kv_F}\ln\left|\frac{\omega - kv_F}{\omega + kv_F}\right|\right), \tag{7.90}$$

$$\operatorname{Im}\chi(\omega,\, k) = \pi\mu_B^2\nu_0\,\frac{\omega}{kv_F}\,\theta\left(kv_F - |\omega|\right). \tag{7.91}$$

Заметим, что эти выражения, верные при произвольной температуре $0 \leqslant T \ll E_F$, в точности совпадают с вещественной и мнимой частями восприимчивости, найденной в задаче 24б при $T = 0$.

37в. Сначала рассмотрим мацубаровскую восприимчивость (7.26) спина во внешнем поле:

$$\chi(\omega_n) = \frac{\mu^2}{2}\int_{-\beta}^{\beta}\langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{\mathbf{s}}_z(\tau)\widehat{\mathbf{s}}_z(0)\rangle e^{i\omega_n\tau}\,d\tau, \tag{7.92}$$

где μ — магнитный момент спина. Поскольку гамильтониан $\widehat{\mathscr{H}}_0$ свободного спина в отсутствие внешнего поля равен нулю, динамика отсутствует. Поэтому $\widehat{\mathrm{s}}_z(\tau)\widehat{\mathrm{s}}_z(0)=\widehat{\mathrm{s}}_z^2(\tau)=1$ и, следовательно,

$$\chi(\omega_n)=\begin{Bmatrix}\beta\mu^2 & \text{при } \omega_n=0\\ 0 & \text{при } \omega_n\neq 0\end{Bmatrix}=\frac{\beta\mu^2}{1+\tau_0\omega_n},\quad \tau_0T\gg 1. \tag{7.93}$$

Мы записали результат в виде, позволяющем продолжить $\chi(\omega_n)$ с мнимых значений частоты на вещественные (τ_0 — вспомогательный параметр). Аналитическое продолжение дает $\chi(\omega)=\beta\mu^2/(1-i\tau_0\omega)$. Переходя к статическому пределу $\omega\to 0$, убеждаемся в том, что мацубаровская восприимчивость дает закон Кюри.

Теперь найдем восприимчивость, используя динамику в реальном времени. Следуя логике, обычно приводящей к формуле Кубо, рассмотрим среднее значение намагниченности в какой-то момент времени:

$$\langle\mu\widehat{\mathrm{s}}_z(t)\rangle=\mu\,\mathrm{Tr}\left(e^{i\widehat{\mathscr{H}}(t-t_0)}\widehat{\mathrm{s}}_z(t_0)e^{-i\widehat{\mathscr{H}}(t-t_0)}\widehat{\rho}\right),\quad \widehat{\mathscr{H}}=-\mu\widehat{\mathrm{s}}_zB_{\mathrm{ext}}, \tag{7.94}$$

где $\widehat{\rho}=Z^{-1}\exp\left(-\beta\widehat{\mathscr{H}}\right)$. Чтобы получить линейный отклик, надо разложить выражение (7.94) по B_{ext}, выделив линейный вклад. В стандартном выводе формулы Кубо по степеням B_{ext} разлагаются операторы эволюции $e^{\mp i\widehat{\mathscr{H}}(t-t_0)}$, что дает среднее от коммутатора операторов спина в различные моменты времени. При этом зависимостью матрицы плотности $\widehat{\rho}$ от B_{ext} пренебрегают на том основании, что в пределе $t-t_0\to\infty$ зависимость от начальных условий в момент t_0 отсутствует. Однако это справедливо только в том случае, когда эволюция системы характеризуется «потерей памяти» о начальном состоянии, либо в силу эргодичности, либо из-за релаксационного характера динамики. В нашем же случае, поскольку $\widehat{\mathscr{H}}_0=0$, эволюция невозмущенной системы вообще отсутствует, в результате чего система бесконечно долго помнит начальное состояние. Поэтому при нахождении линейного отклика следует разложить по B_{ext} не только операторы эволюции, но и матрицу плотности $\widehat{\rho}$ начального состояния. Как нетрудно видеть, это приводит к закону Кюри $\chi=\beta\mu^2$.

Таким образом, формула Кубо в своей обычной форме дает правильный ответ для восприимчивости только в том случае, когда при эволюции система «забывает» о начальном состоянии. Если же это не так, следует либо поправлять формулу Кубо, вводя в нее члены, зависящие от начального состояния, либо использовать мацубаровскую восприимчивость.

38. Гриновская функция фононов определяется через поле деформации $\widehat{\varphi}(\mathbf{r},t)$ (см. (6.5)). Сравнивая выражение (6.5) с оператором (6.1) поля смещений решетки $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$, убеждаемся в том, что для дебаевских фононов с линейным законом дисперсии $\omega(\mathbf{k})=c|\mathbf{k}|$ поле деформации $\widehat{\varphi}$ есть $c\sqrt{\rho}\,\mathrm{div}\,\widehat{\mathbf{u}}$. Следовательно, функция Грина фононов

$$D(\mathbf{r},\,\tau)=-\frac{c^2}{\rho}\langle\mathrm{T}_\tau\widehat{\varphi}(\mathbf{r},\tau)\,\widehat{\varphi}(0,0)\rangle_{\mathrm{T}}=$$

$$=-T\sum_{\omega_n}\int\frac{\omega(\mathbf{k})^2}{\omega_n^2+\omega(\mathbf{k})^2}\,e^{-i\omega_n\tau+i\mathbf{kr}}\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D} \tag{7.95}$$

представляет собой коррелятор $\mathrm{div}\,\mathbf{u}$, умноженный на ρc^2. Поэтому коррелятор самих смещений [9] получается делением фононного пропагатора на $\rho\omega_{\mathbf{k}}^2$:

$$C_{\mathrm{T}}(r)=\frac{T}{\rho}\sum_{\omega_n}\int\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega_n^2+\omega_{\mathbf{k}}^2}\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}. \tag{7.96}$$

Выполним суммирование по мацубаровским частотам с помощью формулы:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{n^2+a^2}=\frac{\pi}{a}\,\mathrm{cth}(\pi a). \tag{7.97}$$

Получаем

$$C_{\mathrm{T}}(r)=\frac{1}{2\rho}\int\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega(\mathbf{k})}\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega(\mathbf{k})}{2T}\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}. \tag{7.98}$$

Удобно разделить вклады тепловых и квантовых флуктуаций в выражении (7.98), воспользовавшись представлением

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega}{2T}=\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\beta\omega}-1}\equiv\frac{1}{2}+n_B(\omega), \tag{7.99}$$

где $n_B(\omega)$ — функция распределения Бозе. Очевидно, что $1/2$ есть вклад нулевых колебаний, а $n_B(\omega)$ — тепловые флуктуации. Формулу (7.98) в таких обозначениях можно получить, не пользуясь мацубаровскими функциями Грина, а просто усредняя вторично квантованные операторы смещений (6.1) по гиббсовской матрице плотности.

Используя (7.99), представим (7.98) в виде $C_{\mathrm{T}}(r)=C_0(r)+\Delta C_{\mathrm{T}}(r)$, где

$$C_0(r)=\frac{1}{2\rho}\int\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega(\mathbf{k})}\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}, \tag{7.100}$$

$$\Delta C_{\mathrm{T}}(r)=\frac{1}{\rho}\int\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega(\mathbf{k})}\,n_B(\omega(\mathbf{k}))\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}. \tag{7.101}$$

Коррелятор $\Delta C_{\mathrm{T}}(r)$ будет интересовать нас при $r\gg c/T$. В этом случае важен вклад лишь от достаточно малых $k\approx 1/r$, таких что $\omega(\mathbf{k})\ll T$. Соответственно, разлагая бозевскую функцию распределения в (7.99) при малом ω, получаем

$$\Delta C_{\mathrm{T}}(r)\approx\frac{T}{\rho}\int\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega^2(\mathbf{k})}\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}. \tag{7.102}$$

Отметим, что (7.102) есть прямое следствие теоремы о равнораспределении из классической статистической физики.

[9] Строго говоря, это дает коррелятор продольных компонент смещений $\mathbf{u}_\parallel\parallel\mathbf{k}$. Однако, поскольку корреляторы всех компонент смещений одинаковы по порядку величины, мы ограничимся рассмотрением лишь продольных компонент.

После проведенной подготовки приступим к вычислению $C_0(r)$ и $\Delta C_{\text{т}}(r)$ в разных размерностях. Вначале вычислим $C_0(r)$.

А. $D=3$:

$$C_0^{(3)}(r)=\frac{4\pi}{(2\pi)^3\rho}\int\limits_0^\infty \frac{\sin(kr)}{kr}\frac{k^2\,dk}{ck}=\frac{1}{4\pi^2\rho c r^2}. \tag{7.103}$$

Здесь использована формула

$$\int e^{i\mathbf{a}\mathbf{n}}do_{\mathbf{n}}=4\pi(\sin a)/a. \tag{7.104}$$

Б. $D=2$:

$$C_0^{(2)}(r)=\frac{1}{4\pi\rho c}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}e^{ikr\cos\theta}dk=\frac{1}{4\pi\rho c}\int\limits_0^\infty J_0(kr)\,dk=\frac{1}{4\pi\rho c r}. \tag{7.105}$$

В. $D=1$:

$$C_0^{(1)}(r)=\frac{1}{4\pi\rho c}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{ikr}\frac{dk}{|k|}=\frac{1}{2\pi\rho c}\int\limits_0^\infty\cos kr\,\frac{dk}{k}=\frac{1}{2\pi\rho c^2}\ln\frac{L}{r}. \tag{7.106}$$

При вычислении последнего интеграла, который формально расходится, необходимо обрезать логарифмическую расходимость. Как обычно, обрежем интеграл сверху на $k\approx 1/r$ (при бо́льших k осцилляции $\cos kr$ обеспечивают сходимость), а снизу — на $k\approx 1/L$, где L — размер системы (гармоник с меньшими k не существует).

Теперь рассмотрим тепловые флуктуации.

А. $D=3$:

$$\Delta C_{\text{т}}^{(3)}(r)=\frac{T}{2\pi^2\rho c R}\int\limits_0^\infty\sin(kr)\,\frac{dk}{k}=\frac{T}{4\pi\rho c r}. \tag{7.107}$$

Б. $D=2$:

$$\Delta C_{\text{т}}^{(2)}(r)=\frac{T}{(2\pi)^2\rho c^2}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^{2\pi}e^{ikr\cos\theta}\,\frac{dk\,d\theta}{k}. \tag{7.108}$$

Этот расходящийся интеграл вычисляется так же, как и интеграл для $C_0^{(1)}(r)$:

$$\Delta C_{\text{т}}^{(2)}(r)=\frac{T}{2\pi\rho c^2}\ln\frac{L}{r}. \tag{7.109}$$

В. $D=1$:

$$\Delta C_{\text{т}}^{(1)}(r)=\frac{T}{\pi\rho c^2}\int\limits_{\approx L^{-1}}^{\infty}\cos(kr)\,\frac{dk}{k^2}=\alpha\frac{TL}{\rho c^2}. \tag{7.110}$$

В этом случае интеграл при малых k расходится не логарифмически, а степенным образом. Поэтому определение коэффициента α в этом соотношении в общем виде невозможно: в частности, величина α зависит от граничных условий, а также от расположения точек, в которых измеряются смещения, по отношению к границе системы.

Полученные результаты позволяют исследовать вопрос о разрушении дальнего порядка квантовыми и тепловыми флуктуациями. Для этого необходимо изучить поведение $C_{\text{т}}(r)$ при $r\to\infty$. Если при этом $C_{\text{т}}(r)\to 0$, то дальний порядок флуктуациями не разрушается — даже значительное отклонение $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ от среднего значения не оказывает существенного влияния на $\mathbf{u}(\mathbf{r}')$ в далеких точках $\mathbf{r}'$. А вот если $C_{\text{т}}(r)\to\infty$, то это означает, что дальний порядок исчезает. Как видно из проделанных вычислений, такая ситуация имеет место для квантовых флуктуаций при $D=1$, а для тепловых — при $D=1,\ 2$.

Изучая результаты, сведенные в табл. 7.1, можно также сделать наблюдение, что с понижением размерности системы D смещения $\mathbf{u}$ в

Таблица 7.1

Вклад тепловых и квантовых флуктуаций в корреляционную функцию

D	$C_0(r)$	$\Delta C_{\text{т}}(r)$
3	порядка $1/r^2$	порядка T/r
2	порядка $1/r$	порядка $T\ln(L/r)$
1	порядка $\ln(L/r)$	порядка TL

далеких точках становятся более скоррелированными. Объяснить это можно следующим образом. Представим себе одномерный кристалл, в котором взаимодействуют лишь ближайшие соседи. Предположим, что за счет флуктуаций один из атомов слегка сместился. Тогда соседние с ним атомы начнут подстраиваться под это новое «неправильное» положение. Затем перестроятся атомы, соседние с уже сместившимися, и так далее. Таким образом, смещение одного атома вызывает перестройку всей цепочки. Поэтому нескольких локальных флуктуаций оказывается достаточно, чтобы дальний порядок «забылся». Однако, с повышением размерности роль флуктуаций уменьшается, потому что каждый атом «слышит подсказку» о том, какое положения он должен был бы занять в идеальной решетке, от все большего числа соседей и более далеких атомов. Поэтому чем выше размерность, тем труднее перестроить систему, смещая один атом.

39 а. Запишем выражение для мацубаровского поляризационного оператора

$$\Pi(i\omega_n,\ k)=\frac{2T}{2\pi}\sum_{\omega_m}\int\frac{dp}{(i\omega_m+i\omega_n-\xi_{p+k})\,(i\omega_m-\xi_p)} \tag{7.111}$$

и найдем сумму по ω_m с помощью тождества (7.85), полученного в задаче 37б:

$$\Pi(i\omega_n,k)=\frac{1}{\pi}\int\frac{n_F(\xi_{p+k})-n_F(\xi_p)}{i\omega_n-\xi_{p+k}+\xi_p}\,dp. \tag{7.112}$$

Нас интересуют значения k вблизи $\pm 2p_0$. Пользуясь четностью $\Pi(i\omega_n, k)$ по k, рассмотрим $k \approx 2p_0$ и введем обозначения:

$$k \equiv 2p_0 + q, \quad p \equiv -p_0 + x - \frac{q}{2}, \quad p + k \equiv p_0 + x + \frac{q}{2}. \tag{7.113}$$

При малых $|x|, |q| \ll p_0$ можно линеаризовать закон дисперсии. При этом

$$\Pi(i\omega_n, k = 2p_0 + q) = \frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{n_F\left(v_F(x + q/2)\right) - n_F\left(-v_F(x - q/2)\right)}{i\omega_n - 2v_F x}\, dx. \tag{7.114}$$

Удобно переписать это выражение следующим образом:

$$\frac{\nu_{1D}}{2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \operatorname{th}\frac{\beta\xi}{2} \cdot \left(\frac{1}{i\omega_n - v_F q - 2\xi} + \frac{1}{i\omega_n + v_F q - 2\xi}\right) d\xi, \tag{7.115}$$

где $\xi = v_F x$, $\nu_{1D} = 1/(\pi v_F)$. Интеграл по ξ в (7.115) нетрудно вычислить, воспользовавшись известным представлением

$$\operatorname{th} z = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z - \pi i(m + 1/2)}, \quad z = \frac{\beta\xi}{2}. \tag{7.116}$$

Получаем следующее выражение:

$$-\frac{\nu_{1D}}{2} \sum_{m=0}^{m_*} \left(\frac{1}{m + 1/2 + w_+} + \frac{1}{m + 1/2 + w_-}\right), \quad w_\pm = \frac{|\omega_n| \pm i v_F q}{4\pi T}. \tag{7.117}$$

Логарифмическая расходимость суммы по m должна быть обрезана так, чтобы максимальная энергия $E_0 = 2\pi T(2m_* + 1)$ была порядка E_F. (При энергиях $E > E_0$ линеаризованный закон дисперсии перестает быть справедливым.) Преобразуем сумму (7.117), прибавляя и вычитая значение выражения (7.117) при $w_\pm = 0$:

$$\begin{gathered} -\nu_{1D} \sum_{m=0}^{m_*} \frac{1}{m + 1/2} - \\ -\frac{\nu_{1D}}{2} \sum_{m=0}^{m_*} \left(\frac{1}{m + 1/2 + w_+} + \frac{1}{m + 1/2 + w_-} - \frac{2}{m + 1/2}\right), \end{gathered} \tag{7.118}$$

Удобство данного представления в том, что первая сумма не зависит от $w_\pm$, а вторая — сходится, и поэтому в ней можно распространить суммирование на произвольно большие m. Вычисляя первую сумму с логарифмической точностью, получаем окончательное выражение

$$\Pi(i\omega_n, k) = -\nu_{1D} \ln\frac{E_0}{4\pi T} + \frac{\nu_{1D}}{2}\left(\psi\left(\frac{1}{2} + w_+\right) + \psi\left(\frac{1}{2} + w_-\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right), \tag{7.119}$$

где

$$\psi(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} = -\gamma - \sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{1}{k + z} - \frac{1}{k + 1}\right), \tag{7.120}$$

$\gamma = 0,5772157\ldots$ — постоянная Эйлера.

Теперь найдем мацубаровскую функцию Грина фононов. Запишем для этого уравнение Дайсона:

$$\begin{aligned} D^{-1}(i\omega_n, k) &= D_0^{-1}(i\omega_n, k) - g^2\Pi(i\omega_n, k) = \\ &= -\frac{\omega_n^2 + \omega_0^2(k)}{\omega_0^2(k)} - g^2\Pi(i\omega_n, k). \end{aligned} \tag{7.121}$$

Получаем

$$D(i\omega_n, k) = -\frac{1}{\left(1 + \omega_n^2/\omega_0^2(k) + g^2\Pi(i\omega_n, k)\right)}. \tag{7.122}$$

Интересующая нас корреляционная функция смещений $\langle u_k(t) u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}}$ есть не что иное, как

$$\begin{aligned} \langle u_k(t) u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}} &= -T\sum_n \frac{1}{\rho\omega_0^2(k)} D(i\omega, k) = \\ &= \sum_n \frac{T}{\rho\omega_0^2(k)\left(1 + \omega_n^2/\omega_0^2(k) + g^2\Pi(i\omega_n, k)\right)} \end{aligned} \tag{7.123}$$

(см. решение задачи 38). При достаточно высокой температуре T в сумме (7.123) при всех n знаменатель дроби не обращается в нуль. Однако, поскольку при уменьшении T поляризационный оператор $\Pi(i\omega_n, k)$ становится все более и более отрицательным, при достижении некоторого значения $T = T_c$ один из членов в сумме по n может начать расходиться. Расходимость флуктуаций $\langle u_k(t) u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}}$ свидетельствует о неустойчивости системы по отношению к возникновению модуляции с данным k.

Нетрудно показать, что чем меньше $|\omega_n|$, тем выше температура, при которой знаменатель выражения (7.123) обращается в нуль. Аналогично, максимальное значение температуры, при которой расходятся флуктуации, достигается при $k = 2p_0$. Поэтому волновой вектор модуляции, возникающей вследствие неустойчивости, есть $k = 2p_0$.

Иными словами, температура фазового перехода определяется из условия обращения в нуль частоты фононов с $k = 2p_0$. Подставляя $\omega_n = 0$ в (7.122), получаем условие на температуру перехода: $g^2\Pi_0 + 1 = 0$, где $\Pi_0 = \Pi(\omega_n = 0, k = 2p_0)$. Решая уравнение $g^2\nu_{1D}\ln(E_0/T_c) = 1$, находим

$$T_c \approx E_0 e^{-1/g^2\nu_{1D}}. \tag{7.124}$$

Заметим, что температура перехода T_c по порядку величины совпадает с выражением (6.81) для щели Δ_0 при $T = 0$.

39б. Нас интересует окрестность температуры перехода T_c, при которой в сумме (7.123) расходится член с $n = 0$. При этом существенно то, что поскольку последовательность частот $\omega_n = 2\pi T n$ дискретна, слагаемые с $n \neq 0$ имеют регулярное поведение в окрестности $k = \pm 2p_0$. Поэтому ими можно пренебречь по сравнению с особым вкладом с $n = 0$.

Поэтому рассмотрим поляризационный оператор $\Pi(i\omega_n, k)$ при $\omega_n = 0$ и k в окрестности $2p_0$. Разлагая выражение (7.119) при малом $q = k - 2p_0$, получаем

$$\Pi(q) \equiv \Pi(\omega_n = 0, k = 2p_0 + q) = \\ = -\nu_{1D}\left(\ln\frac{E_0}{4\pi T} - aq^2\right), \quad a = -\frac{v_F^2\psi''(1/2)}{(4\pi T)^2}, \tag{7.125}$$

причем, согласно (7.120), величина $\psi''(1/2)$ есть

$$\psi''\left(\frac{1}{2}\right) = -2\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(k+1/2)^3} = -2(2^3-1)\zeta(3) = -14\zeta(3). \tag{7.126}$$

Подставим разложение $\Pi(q)$ в коррелятор смещений (7.123), оставляя только член суммы с $n = 0$, и примем во внимание, что при $T = T_c$ выполняется равенство $1 + g^2\Pi(q=0) = 0$. Получаем следующее выражение:

$$\langle u_k(t)u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}} = \frac{T}{g^2\nu_{1D}\rho\omega_0^2(2p_0)\left(\ln(T/T_c) + aq^2\right)}. \tag{7.127}$$

При T вблизи T_c разлагаем $\tau \equiv \ln(T/T_c) = (T - T_c)/T_c$. Получаем искомый лоренцев спектр (7.36) флуктуаций (7.33) поля $Q(r, t)$:

$$\langle Q_q(t)Q_{-q}(t)\rangle_{\text{т}} = \frac{A}{\tau + aq^2}, \quad A = \frac{T_c}{g^2\nu_{1D}\rho\omega_0^2(2p_0)}. \tag{7.128}$$

Чтобы получить коррелятор поля смещений $u(x, t)$, заметим, что зависимость (7.128) имеет место как в окрестности $k \approx 2p_0$, так и в окрестности $k \approx -2p_0$. Поэтому

$$C_{\text{т}}(r) = \int\frac{A}{\tau + aq^2}\left(e^{i(q+2p_0)r} + e^{i(q-2p_0)r}\right)\frac{dq}{2\pi} = \frac{A}{\tau b_{\text{т}}}e^{-|r|/b_{\text{т}}}\cos(2p_0 r), \tag{7.129}$$

где $b_{\text{т}} = (a/\tau)^{1/2}$ — так называемая *корреляционная длина*. Обратим внимание на то, что корреляционная длина $b_{\text{т}}$ обращается в бесконечность при приближении к T_c и корреляционная функция $C_{\text{т}}(r)$ перестает экспоненциально убывать. Это типичное для фазовых переходов второго рода проявление возникновения дальнего порядка в системе.

Рассмотренная задача иллюстрирует общий метод исследования фазовых переходов второго рода с помощью диаграммной техники. Вначале нужно исследовать флуктуации параметра порядка в квадратичном приближении. (В данном случае параметром порядка является фурье-компонента смещения решетки с волновым вектором $k = 2p_0$.) Если фазовый переход действительно имеет место, то должна существовать температура, при которой система «размягчается» настолько, что корреляционная функция в импульсном представлении обращается в бесконечность. Это и есть температура перехода, полученная в рамках теории среднего поля.

Следующим шагом (который мы здесь не сделали) должно быть изучение длинноволновых флуктуаций параметра порядка. Взаимодействие флуктуаций друг с другом описывается диаграммой, показанной на рис. 7.4 (индексы $\pm$ обозначают электроны с импульсами $\pm p_0$), а также подобными ей более сложными диаграммами. Эффекты взаимодействия флуктуаций важны для правильного понимания термодинамики системы в окрестности фазового перехода.

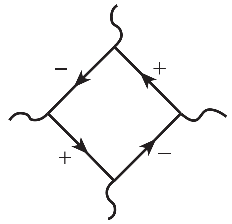

Рис. 7.4

40 а. Покажем, что аналитическое продолжение мацубаровской функции Грина $G(i\omega_n, \mathbf{p})$ с верхней (нижней) мнимой полуоси дает запаздывающую (опережающую) функцию Грина $G^{R(A)}(\omega, \mathbf{p})$. Будем действовать по той же схеме, что и в задаче 37. Мы рассмотрим лишь случай фермионов, ибо для случая бозе-частиц доказательство получается аналогично.

Выразим запаздывающую и опережающую функции Грина (7.21), (7.22) через матричные элементы $\langle n|\widehat{\psi}|m\rangle$ в базисе собственных состояний. Выражая средние в (7.21), (7.22) через след и производя точно такие же преобразования, как в задаче 37, получим

$$G^{R(A)}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{Z}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{\omega - \omega_{nm} \pm i0}\langle n|\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}')|m\rangle\langle m|\widehat{\psi}(\mathbf{r})|n\rangle, \tag{7.130}$$

где $\omega_{nm} = E_n - E_m$. Вычисление мацубаровской функции Грина

$$G(i\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_n\tau}\,\langle \mathrm{T}_\tau\,\widehat{\psi}_M(\mathbf{r}, \tau)\,\widehat{\psi}_M^+(\mathbf{r}', 0)\rangle_{\text{т}}\,d\tau \tag{7.131}$$

также совершенно аналогично тому, которое было проделано в задаче 37. Результат таков:

$$G(i\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{Z}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{i\omega_n - \omega_{nm}}\langle n|\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}')|m\rangle\langle m|\widehat{\psi}(\mathbf{r})|n\rangle. \tag{7.132}$$

Сравнивая это выражение с (7.130) и рассуждая так же, как в задаче 37, убеждаемся в том, что аналитическое продолжение $G(i\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ с верхней мнимой полуоси дает $G^R(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, а с нижней — $G^A(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

40 б. (*Первое решение.*) Перепишем мацубаровскую собственно-энергетическую часть (7.37), выразив при помощи интегрального представления (7.24) мацубаровские функции Грина через соответствующие запаздывающие функции. Получаем

$$\Sigma(i\varepsilon_n, \mathbf{p}) = -g^2 T \sum_{\varepsilon'_m} \int \frac{\operatorname{Im} G_n^R(x, \mathbf{p}_1)}{x - i\varepsilon'_m} \frac{\operatorname{Im} D^R(\omega, \mathbf{p}-\mathbf{p}_1)}{\omega - i\varepsilon_n + i\varepsilon'_m} \frac{dx\,d\omega}{\pi^2} \frac{d^3\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3}, \tag{7.133}$$

где оба интеграла по $dx\,d\omega$ берутся по всей вещественной оси. Мацубаровскую сумму по ε'_m можно вычислить с помощью разложения на простейшие дроби:

$$\mathscr{F} = T\sum_{\varepsilon'_m} \frac{1}{x - i\varepsilon'_m} \frac{1}{\omega - i\varepsilon_n + i\varepsilon'_m} = \\ = \frac{T}{\omega + x - i\varepsilon_n} \sum_{\varepsilon'_m} \left(\frac{1}{x - i\varepsilon'_m} + \frac{1}{\omega - i\varepsilon_n + i\varepsilon'_m} \right). \tag{7.134}$$

Исходная мацубаровская сумма сходится, но каждая из сумм в (7.134) расходится. Поэтому добавим в (7.134) множитель сходимости $\exp(i\varepsilon'_m\tau)$, где $\tau \to +0$. Тогда величину $i\varepsilon_n$ во втором слагаемом можно исключить, сдвинув переменную суммирования. После этого сдвига суммирование будет происходить уже не по фермиевским, а по бозевским частотам, так как обе мацубаровские частоты ε_n и ε'_m нечетны. Кроме того, каждый из членов в (7.134) можно представить как значение мацубаровской функции Грина в совпадающие моменты времени для системы с одним уровнем (в первом слагаемом энергия уровня равна $(-x)$, а во втором — ω). Поэтому сумма (7.134) выражается через числа заполнения:

$$\mathscr{F} = \frac{n_F(-x) + n_B(\omega)}{\omega + x - i\varepsilon_n} = \frac{1}{2(\omega + x - i\varepsilon_n)} \left(\operatorname{th}\frac{x}{2T} + \operatorname{cth}\frac{\omega}{2T} \right). \tag{7.135}$$

Продолжение полученного выражения на вещественную ось выполняется с помощью замены $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i0$. Таким образом, получаем требуемое выражение для запаздывающей функции:

$$\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = g^2 \times \\ \times \int \frac{\operatorname{Im} G_n^R(x, \mathbf{p}_1)\,\operatorname{Im} D^R(\omega, \mathbf{p}-\mathbf{p}_1)}{\varepsilon - \omega - x + i0} \left(\operatorname{th}\frac{x}{2T} + \operatorname{cth}\frac{\omega}{2T} \right) \frac{d^3\mathbf{p}_1\,d\omega\,dx}{\pi(2\pi)^4}. \tag{7.136}$$

40 б. (*Второе решение.*) Чтобы использовать аналитические свойства мацубаровских функций, применим стандартный прием, позволяющий преобразовать сумму (7.37) в контурный интеграл. Рассмотрим сумму

$$S = T\sum_{\varepsilon_1} G(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1) D(\varepsilon - \varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1), \tag{7.137}$$

где суммирование происходит по $\varepsilon_1 = (2n+1)\,i\pi T$. Для определенности будем считать, что ε лежит в верхней полуплоскости. Одновремен-

но рассмотрим функцию

$$f(z) = G(z, \mathbf{p}_1)\, D(\varepsilon - z, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)\, \operatorname{th}\frac{z}{2T}, \tag{7.138}$$

имеющую полюсы при $z = \pi T(2n+1)i$. Вычислим интеграл

$$I = \oint_C f(z)\, dz, \tag{7.139}$$

взятый по контуру C, изображенному на рис. 7.5.

Заметим, что в каждой из трех областей $\operatorname{Im} z < 0$, $0 < \operatorname{Im} z < \operatorname{Im}\varepsilon$, $\operatorname{Im}\varepsilon < \operatorname{Im} z$ функция $f(z)$ допускает аналитическое продолжение с дискретных точек на мнимой оси во всю область. Это позволяет вычислить контурный интеграл с помощью теории вычетов. Вычет $f(z)$ в полюсе $z_n = \pi T i(2n+1)$ равен

$$\operatorname*{Res}_{z=z_n} f(z) = 2\,T\, G(z_n, \mathbf{p}_1)\, D(\varepsilon - z_n, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1). \tag{7.140}$$

Поэтому $I = 4\pi i S$.

В то же время аналитичность $f(z)$ позволяет деформировать контур интегрирования, как показано на рис. 7.6. При этом интеграл по

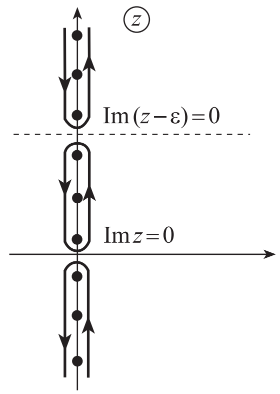

Рис. 7.5

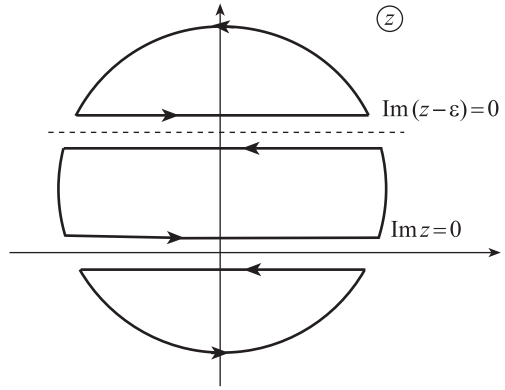

Рис. 7.6

контуру C сводится к двум интегралам вперед и назад по горизонтальным прямым $z = x$ и $z = \varepsilon + x$, $-\infty < x < \infty$, и мы приходим к равенству:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \Big[\Big(G^R(x) - G^A(x) \Big) D^R(\varepsilon - x) \operatorname{th}\frac{x}{2T} + \\ + G^R(x+\varepsilon) \left(D^A(-x) - D^R(-x) \right) \operatorname{th}\frac{\varepsilon + x}{2T} \Big] dx. \tag{7.141}$$

Зависимость гриновских функций от импульсов, опущенная в (7.141) для краткости, будет восстановлена ниже. Заметим, что поскольку $\varepsilon =$

$= i\pi T(2n+1)$, в выражении (7.141) можно заменить $\operatorname{th}[(\varepsilon+x)/2T]$ на $\operatorname{cth}[x/2T]$.

Выразим теперь все стоящие здесь величины через мнимые части функций Грина. Из (7.130) видно, что опережающая и запаздывающая функции Грина отличаются лишь знаком перед $i0$, поэтому

$$G^R(\varepsilon,\mathbf{p}) - G^A(\varepsilon,\mathbf{p}) = 2i\,\operatorname{Im} G^R(\varepsilon,\mathbf{p}). \tag{7.142}$$

Кроме того, из аналитических свойств функций Грина следует, что они удовлетворяют соотношениям типа Крамерса–Кронига:

$$G^R(\varepsilon,\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(\omega,\mathbf{p})}{\omega-\varepsilon-i0}\,d\omega, \quad G^A(\varepsilon,\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(\omega,\mathbf{p})}{\omega-\varepsilon+i0}\,d\omega. \tag{7.143}$$

Подставляя эти выражения в (7.141), получаем

$$I = \frac{2i}{\pi}\times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\operatorname{Im} G^R(x)\operatorname{Im} D^R(\omega)}{\omega-\varepsilon+x-i0}\operatorname{th}\frac{x}{2T} + \frac{\operatorname{Im} G^R(\omega)\operatorname{Im} D^R(x)}{\omega-\varepsilon-x-i0}\operatorname{cth}\frac{x}{2T}\right)dx\,d\omega. \tag{7.144}$$

Воспользовавшись соотношением $\operatorname{Im} D^R(-x) = -\operatorname{Im} D^R(x)$, сделаем во втором слагаемом замену $x\to -x$, после чего поменяем местами в этом слагаемом переменные x и ω. Получаем окончательный результат:

$$I = \frac{2i}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\operatorname{Im} G^R(x)\operatorname{Im} D^R(\omega)}{\omega-\varepsilon+x-i0}\left(\operatorname{th}\frac{x}{2T}+\operatorname{cth}\frac{\omega}{2T}\right)dx\,d\omega. \tag{7.145}$$

Теперь, пользуясь соотношением $I = 4\pi i S$, находим S. Восстанавливая зависимость от импульсов $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}_1$ и интегрируя по $d^3\mathbf{p}_1$, получаем искомое сотношение (7.38).

Как уже было отмечено, равенство (7.38) имеет совершенно общий характер и не зависит от конкретного вида функций Грина $G^R(\varepsilon,\mathbf{p})$ и $D^R(\omega,\mathbf{p})$. Применение соотношения (7.38), однако, оказывается особенно удобным в случае свободных частиц, поскольку при этом мнимые части затравочных функций $G^R(\varepsilon,\mathbf{p})$ и $D^R(\omega,\mathbf{p})$ пропорциональны δ-функциям — см. задачу 41б.

41 а. Запаздывающая функция Грина может быть получена из мацубаровской функции (7.122) аналитическим продолжением с дискретных частот $\omega_n \geqslant 0$. Выполняя замену $i\omega_n \to \omega$ в поляризационном операторе (7.119) и разлагая по малым ω и $q = k - 2p_0$, получаем [10])

[10]) Согласно (7.120) $\psi'(1/2) = 3\zeta(2)$, $\psi''(1/2) = -14\zeta(3)$.

$$\Pi(i\omega_n,k) = -\nu_{1D}\left(\ln\frac{E_0}{4\pi T} - aq^2 + ib\omega\right), \\ b = \frac{\psi'(1/2)}{4\pi T},\ a = -\frac{v_F^2\psi''(1/2)}{(4\pi T)^2}. \tag{7.146}$$

Подставляя это разложение в (7.122) и учитывая, что при $T = T_c$ имеет место равенство $1 + g^2\Pi_0 = 0$, получаем выражение для запаздывающей функции Грина:

$$D(\omega, k = 2p_0+q) = -\left[g^2\nu_{1D}\left(\ln(T/T_c) + aq^2 - ib\omega\right) - \omega^2/\omega_0^2(k)\right]^{-1}. \tag{7.147}$$

При $T\to T_c$ разлагаем $\ln(T/T_c) = (T-T_c)/T_c \equiv \tau$. Поскольку в этой области характерные ω малы, второе слагаемое в знаменателе выражения (7.147) несущественно, и в результате функция Грина есть

$$D(\omega, k = 2p_0+q) = \frac{1}{g^2\nu_{1D}b\,(i\omega-\gamma(q))}, \quad \gamma(q) = \frac{\tau + aq^2}{b}. \tag{7.148}$$

Полюсы этого выражения определяют закон дисперсии вблизи T_c. Как видно, частота оказывается чисто мнимой: $\omega(q) = -i\gamma(q)$. Это соответствует релаксационной динамике: возмущение с волновым вектором $k = 2p_0 + q$ затухает по закону $e^{-\gamma(q)t}$.

41 б. Найдем собственно-энергетическую часть (7.38) функции Грина одномерных фермионов. Для определенности будем говорить о движущихся направо частицах с линеаризованным законом дисперсии $\varepsilon = v_F p$. Рассеиваясь на мягких фононах с передачей импульса близкого к $-2p_0$, правые «частицы» становятся «левыми» с законом дисперсии $\varepsilon = -v_F p$. Соответственно в выражении (7.38) мнимая часть функции Грина электронов есть $-\pi\delta(\varepsilon_1 + v_F p_1)$. Интегрируя δ-функцию по ε_1, получаем

$$\Sigma^R(\varepsilon,p) = -\frac{g^2}{2\pi}\int\frac{dp_1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\operatorname{Im} D^R(\omega,p-p_1)}{\varepsilon+v_Fp_1-\omega+i0}\left(\operatorname{cth}\frac{\omega}{2T}-\operatorname{th}\frac{v_Fp_1}{2T}\right)d\omega. \tag{7.149}$$

Мнимая часть функции Грина фононов, согласно (7.148), есть

$$\operatorname{Im} D^R(\omega,q) = \\ = -\frac{1}{2bg^2\nu_{1D}}\left(\frac{1}{\omega+i\gamma(q)}+\frac{1}{\omega-i\gamma(q)}\right) = -\frac{\omega}{bg^2\nu_{1D}(\omega^2+\gamma^2(q))}. \tag{7.150}$$

Поскольку $\gamma(q=0) = \tau/b \ll T$, основной вклад в интеграл (7.149) дает область $|\omega| \ll T$. Поэтому можно заменить $\operatorname{cth}\omega/2T$ на $2T/\omega$, что физически соответствует переходу от рассеяния на квантовомеханических фононах к рассеянию на классическом поле. Получающийся в результате сделанного приближения интеграл по ω находится с помощью метода вычетов:

$$\Sigma^R(\varepsilon, p) = \frac{2\pi i}{bg^2\nu_{1D}} \frac{g^2}{2\pi} \int \frac{1}{\widetilde{\varepsilon} + v_F q + i\gamma(q)} \left(\frac{2T}{i\gamma(q)} + \operatorname{th} \frac{v_F(q+p)}{2T} \right) \frac{dq}{2\pi}, \tag{7.151}$$

где $\widetilde{\varepsilon} = \varepsilon + v_F p$, $q = p_1 - p$. Интеграл по q в (7.151) определяется областью $|q| \leqslant (\tau/a)^{1/2} \ll v_F/T$. Поэтому можно пренебречь слагаемым $\operatorname{th}(v_F(q+p)/2T)$ по сравнению с членом $2T/\gamma(q)$, а также — заменить $i\gamma(q)$ в знаменателе первого сомножителя (7.151) на $i0$. В результате

$$\Sigma^R(\varepsilon, p) = \frac{2T}{\pi\nu_{1D}} \int \frac{dq}{(\widetilde{\varepsilon} + v_F q + i0)(\tau + aq^2)} = -\frac{2T}{a\nu_{1D}\lambda(\widetilde{\varepsilon} + iv_F\lambda)}, \tag{7.152}$$

где $\lambda = (\tau/a)^{1/2}$.

Представляет интерес мнимая часть выражения (7.152), описывающая забывание электронами своего импульса из-за рассеяния на мягких фононах:

$$\operatorname{Im}\Sigma^R(\varepsilon, p) = -\frac{2\pi T}{(a(p+\varepsilon/v_F)^2 + \tau)}, \tag{7.153}$$

Время жизни квазичастицы с малой энергией $\varepsilon = v_F p \to 0$, согласно (7.153), оказывается весьма коротким, порядка $\tau/T = (T - T_c)/T_c^2$.

Вообще, как следует из (7.153), рассеяние на мягких фононах существенно меняет функцию Грина в области $|\varepsilon| \leqslant T_c$, $|p| \leqslant T_c/v_F$, поскольку при таких ε и p величина $\Sigma^R(\varepsilon, p)$ оказывается больше характерной энергии квазичастиц. Поэтому наши выводы о поведении $G^R(\varepsilon, p)$ и $\Sigma^R(\varepsilon, p)$ в этой области, основанные на использовании в выражении (7.38) функции Грина свободных электронов, вообще говоря, не имеют количественного смысла. Чтобы получить более надежные результаты, следует использовать перенормированную функцию Грина, в которую включена собственно-энергетическая часть. При этом соотношение (7.38) становится уравнением самосогласования для $\Sigma^R(\varepsilon, p)$.

42. Нас интересует взаимодействие атомов, находящихся в равновесии с тепловым распределением фотонов. Гамильтониан взаимодействия атомов с внешним электрическим полем есть

$$\widehat{V} = -\widehat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_1)\,\widehat{\mathbf{d}}^{(1)} - \widehat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_2)\,\widehat{\mathbf{d}}^{(2)} = \sum_{i=1,2;\ \alpha=x,y,z} \widehat{E}_\alpha(\mathbf{r}_i)\,\widehat{d}^{(i)}_\alpha, \tag{7.154}$$

где $\mathbf{d}^{(1,2)}$ — операторы дипольного момента атомов, а $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ — оператор электрического поля в точке $\mathbf{r}$.

Изменение термодинамического потенциала системы, вызванное взаимодействием (7.154), можно записать так:

$$U \equiv \Omega - \Omega_0 = -T \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \ldots \int_0^\beta \langle \mathrm{T}_\tau\ \widehat{V}(\tau_1)\ldots\ \widehat{V}(\tau_n)\rangle_{\text{т}}\, d\tau_1 \ldots d\tau_n, \tag{7.155}$$

причем усреднение происходит как по флуктуациям дипольных моментов, так и по флуктуациям электрического поля. Нас интересует слагаемое в (7.155), отвечающее взаимодействию двух атомов. Поскольку средний дипольный момент атома равен нулю, очевидно, что интересующие нас члены должны содержать каждый из дипольных моментов $\mathbf{d}^{(1)}$ и $\mathbf{d}^{(2)}$ четное число раз. Поэтому наименьшим порядком теории возмущений, дающим отличный от нуля вклад, оказывается четвертый:

$$U = -\frac{T}{4!} \int_0^\beta \ldots \int_0^\beta \langle \mathrm{T}_\tau\ \widehat{V}(\tau_1)\ldots\ \widehat{V}(\tau_4)\rangle_{\text{т}}\, d\tau_1 \ldots d\tau_4. \tag{7.156}$$

Для вклада в $\Omega - \Omega_0$ порядка n имеется $(n-1)!$ комбинаторных возможностей для образования неприводимого среднего. В нашем случае $n = 4$, и комбинаторный множитель равен $3! = 6$. Кроме того, чтобы исключить эффекты самодействия атомов, мы должны выделить слагаемые, содержащее каждый из дипольных моментов $\mathbf{d}^{(1)}$ и $\mathbf{d}^{(2)}$ по два раза. Это дает еще две возможности для каждого из учтенных неприводимых средних. В результате полное число вкладов интересующего нас вида равно $3! \cdot 2 = 12$. Кроме того, усреднения по флуктуациям дипольных моментов различных атомов статистически независимы, а усреднение по флуктуациям электрического поля можно выполнить по теореме Вика. Таким образом,

$$U_{12} = -\frac{T}{2} \int_0^\beta \ldots \int_0^\beta \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{d}^{(1)}_\alpha(\tau_1)\, \widehat{d}^{(1)}_\beta(\tau_2)\rangle_{\text{т}} \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{d}^{(2)}_\gamma(\tau_3)\, \widehat{d}^{(2)}_\delta(\tau_4)\rangle_{\text{т}} \times$$
$$\times \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{E}_\alpha(\mathbf{r}_1,\, \tau_1)\, \widehat{E}_\gamma(\mathbf{r}_2,\, \tau_3)\rangle_{\text{т}} \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{E}_\beta(\mathbf{r}_1,\, \tau_2)\, \widehat{E}_\delta(\mathbf{r}_2,\, \tau_4)\rangle_{\text{т}} d\tau_1 \ldots d\tau_4.$$

Введем обозначения для коррелятора дипольных моментов:

$$\alpha^{(j)}_{\alpha\beta}(\tau) = \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{d}^{(j)}_\alpha(0)\, \widehat{d}^{(j)}_\beta(\tau)\rangle_{\text{т}}, \quad j = 1, 2, \tag{7.157}$$

и электрических полей:

$$D^E_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\, \tau) = \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{E}_\alpha(0,0)\, \widehat{E}_\beta(\mathbf{r},\, \tau)\rangle_{\text{т}}. \tag{7.158}$$

Для простоты будем считать, что атомы находятся в синглетном состоянии. Тогда

$$\alpha^{(j)}_{\alpha\beta}(\tau) = \alpha_j(\tau)\,\delta_{\alpha\beta}, \tag{7.159}$$

и взаимодействие U_{12} принимает следующий вид:

$$U_{12} = -\frac{T}{2} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta \alpha_1(\tau_1 - \tau_2)\,\alpha_2(\tau_3 - \tau_4)\, D^E_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \tau_1 - \tau_3) \times$$
$$\times D^E_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \tau_4 - \tau_2)\, d\tau_4 \ldots d\tau_1. \tag{7.160}$$

Перейдем к мацубаровскому частотному представлению:

$$\alpha(\tau) = T\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}\,\alpha(i\omega_n). \tag{7.161}$$

Интегрирование по τ делает все частоты в выражении (7.160) равными, и мы получаем

$$U_{12} = -\frac{T}{2}\sum_{\omega_n}\alpha_1(i\omega_n)\,\alpha_2(i\omega_n)\,\left[D^E_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r})\right]^2. \tag{7.162}$$

(Здесь мы воспользовались четностью мацубаровских корреляционных функций по частоте.)

Функцию $D^E_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r})$ можно легко связать с функцией Грина (7.39), приведенной в условии. Поскольку в выбранной нами калибровке $\Phi = 0$, то $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}/c$. Поэтому

$$D^E_{\alpha\beta}(i\omega_n,\mathbf{r}) = \frac{\omega_n^2}{c^2}D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r}) \tag{7.163}$$

и выражение для энергии перепишется как

$$U_{12} = -\frac{T}{2}\sum_{\omega_n}\frac{\omega_n^4}{c^4}\alpha_1(i\omega_n)\,\alpha_2(i\omega_n)\,\left[D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r}_{12})\right]^2. \tag{7.164}$$

Чтобы найти функцию $D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r})$, перейдем из импульсного представления в координатное, заменяя в выражении (7.39) компоненты вектора $\mathbf{k}$ на пространственные производные по правилу: $k_\alpha \to -i\partial/\partial x_\alpha$. Получаем

$$D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\mathbf{r}) = -4\pi\left[\delta_{\alpha\beta} - \frac{c^2}{\omega_n^2}\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha\partial x_\beta}\right]\int\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{k^2+\omega_n^2/c^2}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \tag{7.165}$$

Вычислим интеграл

$$I = \int\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{k^2+a^2}\frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{2\pi^2}\int\limits_0^\infty\frac{\sin kr}{kr}\frac{k^2\,dk}{k^2+a^2} =$$

$$= -\frac{1}{2\pi^2 r}\frac{\partial}{\partial r}\int\limits_0^\infty\frac{\cos kr}{k^2+a^2}\,dk = -\frac{1}{2\pi^2 r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{\pi}{2a}e^{-ar} = \frac{1}{4\pi r}e^{-ar}. \tag{7.166}$$

Наконец, дифференцирование дает

$$D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\mathbf{r}) = \frac{e^{-k_n r}}{k_n^2 r^3}\left[\delta_{\alpha\beta}\left(1+k_n r+k_n^2r^2\right) - n_\alpha\,n_\beta\left(3+3k_n r+k_n^2r^2\right)\right], \tag{7.167}$$

где $k_n = |\omega_n|/c$. Получаем, что величина, входящая в выражение (7.164) для U_{12} есть

$$K(\omega_n,\,r) = k_n^4\left[D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\mathbf{r})\right]^2 =$$

$$= \frac{2e^{-2k_n r}}{r^6}\left(3+6k_n r+5k_n^2r^2+2k_n^3r^3+k_n^4r^4\right). \tag{7.168}$$

Перед тем, как непосредственно приступить к вычислению U_{12}, свяжем мацубаровские функции $\alpha_{(1,2)}(i\omega_n)$ с поляризуемостью атомов. Это возможно, поскольку определяемая по формуле Кубо поляризуемость есть

$$\alpha_{\alpha\beta}(\omega) = i\int\limits_0^\infty e^{i\omega t}\langle[d_\alpha(t),\,d_\beta(0)]\rangle_\tau\,dt. \tag{7.169}$$

Выражение (7.169) при аналитическом продолжении на верхнюю мнимую полуось дает как раз мацубаровскую функцию $\alpha(i\omega_n)$. Воспользовавшись этим, выразим $\alpha(i\omega_n)$ через $\alpha(\omega)$. При $\omega_n > 0$ по формуле Крамерса–Кронига имеем

$$\alpha(i\omega_n) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha''(\omega)}{\omega - i\omega_n}\,d\omega\cdot\frac{2}{\pi}\int\limits_0^\infty\frac{\omega\alpha''(\omega)}{\omega_n^2+\omega^2}\,d\omega, \tag{7.170}$$

где $\alpha''(\omega)$ — мнимая часть поляризуемости (мы воспользовались здесь ее нечетностью). Таким образом, получаем окончательный результат:

$$U_{12} = -\frac{2T}{\pi^2}\sum_{\omega_n}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\infty K(\omega_n,\,r)\frac{\omega_1\,\omega_2\,\alpha_1(\omega_1)\,\alpha_2(\omega_2)}{\left(\omega_n^2+\omega_1^2\right)\left(\omega_n^2+\omega_2^2\right)}\,d\omega_1\,d\omega_2. \tag{7.171}$$

Общее выражение (7.171) справедливо при произвольном расстоянии между атомами. Это выражение упрощается в нескольких интересных предельных случаях. Определим характерные длины

$$\lambda_0 = \frac{c}{\omega_0},\quad \lambda_T = \frac{c}{T}, \tag{7.172}$$

где ω_0 — частота, определяемая частотной дисперсией поляризуемости (фактически, в атомных единицах всегда $\omega_0 \sim 1$). Поскольку λ_0 много больше радиуса атомов, а λ_T, в свою очередь, много больше λ_0, имеется три различные области,

А: $r \ll \lambda_0$; **Б:** $\lambda_0 \ll r \ll \lambda_T$; **В:** $\lambda_T \ll r$.

Рассмотрим по отдельности каждый из этих случаев.

А: В этом случае $k_n r \ll 1$, т. е. запаздывание электромагнитного взаимодействия пренебрежимо мало. Согласно (7.168) при этом $K(\omega_n,\,r) = 6/r^6$.

Поскольку в этой области $k_n\lambda_T \ll 1$, мацубаровскую сумму можно заменить на интеграл по ω:

$$U(r) = -\frac{12\hbar}{\pi^3\,r^6}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\infty\frac{\omega_1\,\omega_2\,\alpha''(\omega_1)\,\alpha''(\omega_2)}{\left(\omega^2+\omega_1^2\right)\left(\omega^2+\omega_2^2\right)}\,d\omega_1\,d\omega_2\,d\omega. \tag{7.173}$$

Интегрируя по ω, получаем[11]:

[11] Соотношения (7.174) и (7.179) были получены Лондоном (1930) и Польдером и Казимиром (1948) — подробнее см. [1], гл. VI; [9], § 85.

$$U(r) = -\frac{6\hbar}{\pi^2 r^6} \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \frac{\alpha''(\omega_1)\,\alpha''(\omega_2)}{\omega_1 + \omega_2}\, d\omega_1\, d\omega_2. \tag{7.174}$$

В области $r \ll \lambda_0$ ван-дер-ваальсово взаимодействие можно вывести и без использования диаграммной техники. Чтобы получить выражение (7.174), надо найти сдвиг энергии основного состояния двух атомов по квантовомеханической теории возмущений:

$$\delta E_0 = -\sum_{m \neq 0} \frac{|\langle m|\widehat{\mathscr{H}}_{12}|0\rangle|^2}{E_m - E_0}, \tag{7.175}$$

где

$$\widehat{\mathscr{H}}_{12} = \frac{1}{r_{12}^3}\,[\widehat{\mathbf{p}}_1 \widehat{\mathbf{p}}_2 - 3(\widehat{\mathbf{p}}_1 \mathbf{n})(\widehat{\mathbf{p}}_2 \mathbf{n})] \tag{7.176}$$

— гамильтониан дипольного взаимодействия двух атомов в пренебрежении запаздыванием.

Б: В этом случае $k_n \lambda_0 \gg 1$ и, значит, необходимо учитывать запаздывание электромагнитного взаимодействия. В то же время, поскольку $k_n \lambda_T \ll 1$, температура по-прежнему эффективно мала, и мацубаровскую сумму в (7.171) можно заменить на интеграл. Этот интеграл определяется областью частот $\omega_n \approx c/r \ll \omega_0$ (из-за экспоненциального множителя в $K(\omega,\, r)$), вследствие чего можно пренебречь ω_n в знаменателях (7.171). В результате интегрирование по $\omega_{1,2}$ даст $\alpha_{1,2}(0)$ в силу соотношений Крамерса–Кронига. Остающийся интеграл по ω в выражении для взаимодействия,

$$U(r) = -\frac{\alpha_1(0)\,\alpha_2(0)}{2\pi} \int\limits_0^\infty K(\omega,\, r)\, d\omega, \tag{7.177}$$

вычисляется с использованием формулы

$$\int\limits_0^\infty x^m\, e^{-ax}\, dx = \frac{m!}{a^{m+1}}. \tag{7.178}$$

В результате получаем так называемое *взаимодействие Казимира*:

$$U(r) = -\frac{23\hbar c\, \alpha_1(0)\, \alpha_2(0)}{4\pi r^7}. \tag{7.179}$$

Отметим, что в области $r \gg \lambda_0$ существенно запаздывание электромагнитного взаимодействия и квантовомеханичность фотонов. Формально это проявляется в том, что взаимодействие (7.179) явно зависит от скорости света и постоянной Планка. Физически сила Казимира (7.179) возникает из-за квантовых флуктуаций электромагнитого излучения в вакууме при $T = 0$.

В: При $r \gg \lambda_T$ все члены в выражении (7.168) с $\omega_n \neq 0$ оказываются экспоненциально малыми. Поэтому в мацубаровской сумме в (7.171) достаточно оставить лишь член с $n = 0$. Тогда интегрирование по $\omega_{1,2}$ даст, как и раньше, статическую поляризуемость, а в $K(r)_{\omega_n = 0}$

достаточно удержать лишь первый член $6/r^6$. Получаем

$$U(r) = -3\, \frac{T\, \alpha_1(0)\, \alpha_2(0)}{r^6}. \tag{7.180}$$

Выражение (7.180), соответствующее пределу «высокой» температуры $T \gg c/r$, по существу элементарно. Его можно получить в рамках классической статистической физики, рассматривая взаимодейстие классических диполей (7.176). Термодинамическое среднее выражения (7.176) равно нулю. Поэтому энергия взаимодействия дается вторым порядком термодинамической теории возмущений:

$$U(r) = -\frac{1}{2T}\, \langle \mathscr{H}_{12}^2 \rangle_{\text{т}}. \tag{7.181}$$

Среднеквадратичные флуктуации дипольного момента можно найти с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы (или даже с помощью теоремы о равнораспределении):

$$\langle d_\alpha\, d_\beta \rangle_{\text{т}} = T\, \alpha(0)\, \delta_{\alpha\beta}. \tag{7.182}$$

В результате получается классическое выражение (7.180).