Краткие сообщения по физике № 2 1980

ТОЧНЫЕ СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ СОБСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ МАТРИЦАМИ В ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКЕ КЕЛДЫША ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ

С. Г. Тиходеев

УДК 530.145

Получены точные соотношения между собственно-энергетическими матрицами в диаграммной технике Келдыша /I/ для неравновесных процессов, аналогичные соотношениям между функциями Грина и упрощающие получение кинетического уравнения.

Диаграммная техника Келдыша для неравновесных процессов /I/ специально приспособлена для получения кинетических уравнений во внешнем поле. Для вычисления средних любых произведений операторов в этой технике вводится операция T_C-упорядочения по временному контуру C, состоящему из осей "положительного" и "отрицательного" времени (t_+ и t_-). По положительному времени проводится обычное T-упорядочение в порядке убывания времен, а по отрицательному - хронолизация по обращенному времени, в порядке его возрастания (операция $\tilde{T}$). Кроме того, считается, что t_+ всегда предшествует t_-. Последнее позволяет вычислять средние от обычного произведения операторов (достаточно лишь снабдить время первого сомножителя индексом –, а второго – +). Функции Грина являются матрицами 2x2 (например, для фермионов $\psi(\bar{r}_i, t_i) \equiv \psi(i)$):

$$\|G\| = \begin{pmatrix} G^C & G^+ \\ G^- & \tilde{G}^C \end{pmatrix}, \qquad (\mathrm{I})$$

где времена G^C-функции расположены на t_+-оси, $\tilde{G}^C$ – на t_-, а $G^\pm$ – на t_+ и t_-:

$$\begin{aligned} G^C(1,2) &= - i\langle T\psi(1)\psi^+(2)\rangle, \\ \tilde{G}^C(1,2) &= - i\langle \tilde{T}\psi(1)\psi^+(2)\rangle, \end{aligned} \qquad (2)$$

$$G^{+}(1,2) = \quad i\langle\psi^{+}(2)\psi(1)\rangle,$$
$$G^{-}(1,2) = -\, i\langle\psi(1)\psi^{+}(2)\rangle,$$

а усреднение производится по правилу $\langle A(t)\rangle = \mathrm{Tr}\{\rho(0)A(t)\}$, где матрица плотности в представлении Гейзенберга $\rho(0)$ берется в момент времени $t = 0$, когда внешнее поле включено полностью.

Легко показать /I/, что

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \mathrm{Tr}\{\rho_0 T_C A_0(t) B_0(t') S_C\}, \qquad (3)$$

где ρ_0 – матрица плотности системы при $t = -\infty$, когда внешнее поле и взаимодействие выключены, A_0 и B_0 – операторы в представлении взаимодействия [ж)],

$$S_C = T_C \exp\left\{- i \int\limits_C \mathcal{H}_{int}(\tau)d\tau\right\}, \qquad (4)$$

а интегрирование производится по описанному выше контуру C. Теория возмущений строится разложением S_C в (3), (4) по степеням $\int\limits_C \mathcal{H}_{int}(\tau)d\tau$. Полные функции Грина, если выполняется теорема Вика, представляются в виде бесконечных рядов, члены которых являются интегралами от потенциала взаимодействия V и свободных функций Грина G_0, определяемых аналогично (I), (2), но только путем усреднения операторов в представлении взаимодействия с матрицей плотности ρ_0.

Уравнение Дайсона для полной функции Грина (I) имеет матричный вид:

$$G(1,2) = G_0(1,2) + i\int d3d4 G_0(1,3)\Sigma(3,4)G(4,2). \qquad (5)$$

где $d3 = d^3r_3dt_3$, а собственно-энергетическая матрица Σ состоит из операторов Σ^C, $\tilde{\Sigma}^C$, $\Sigma^{\pm}$:

$$\|\Sigma\| = \begin{pmatrix} \Sigma^C & \Sigma^+ \\ \Sigma^- & \tilde{\Sigma}^C \end{pmatrix}. \qquad (6)$$

Из функций (2) лишь две являются независимыми (например, G^+ и G^-). Очевидно, что G^C и $\tilde{G}^C$ выражаются через них посредством соотношений

[ж)] Внешнее поле включается в свободный гамильтониан системы $\mathcal{H}_0$.

$$G^C(1,2) = \theta(t_1 - t_2)G^-(1,2) + \theta(t_2 - t_1)G^+(1,2), \quad (7)$$

$$\tilde{G}^C(1,2) = \theta(t_2 - t_1)G^-(1,2) + \theta(t_1 - t_2)G^+(1,2), \quad (8)$$

где $\theta(x) = \begin{cases} 1, & x>0, \\ 0, & x<0. \end{cases}$

Аналогичного типа соотношения имеют место и для собственно-энергетических матриц. Покажем сначала, что при $t_2 > t_1$

$$\Sigma^C(1,2) = \Sigma^+(1,2) \ . \quad (9)$$

Рассмотрим уравнения Дайсона для G^C и G^+ (в операторном виде):

$$\begin{aligned} G^C &= G_0^C + G_0^C(\Sigma^C G^C - \Sigma^+ G^-) + G_0^+(\tilde{\Sigma}^C G^- - \Sigma^- G^C), \\ G^+ &= G_0^+ + G_0^C(\Sigma^C G^+ - \Sigma^+ \tilde{G}^C) + G_0^+(\tilde{\Sigma}^C \tilde{G}^C - \Sigma^- G^+). \end{aligned} \quad (10)$$

Подействуем на (10) оператором $G_0^{-1} = i\partial/\partial t + \nabla^2/2m - u(\bar{r},t)$, где u - внешнее поле. Учтем, что свободные функции Грина удовлетворяют соотношениям

$$G_0^{-1}(1)G_0^C(1,2) = \delta(1-2); \quad G_0^{-1}G_0^{\pm}(1,2) = 0. \quad (11)$$

Найдем разность этих выражений:

$$G_0^{-1}(G^C - G^+) = i \int d3\left[\Sigma^C(1,3)G^C(3,2) - \Sigma^+G^- - \Sigma^C G^+ + \Sigma^+\tilde{G}^C\right]. \quad (12)$$

Из соотношений (7) следует, что при $t_2 > t_1$, $G^C = G^+$. Воспользовавшись (7), выразим правую часть (12) через $G^{\pm}$. Тогда

$$0 = \int d^3r_3 \int\limits_{t_2}^{\infty} dt_3\left[\Sigma^C(1,3) - \Sigma^+(1,3)\right]\left[G^-(3,2) - G^+(3,2)\right]. \quad (13)$$

Разложим сомножители под интегралом в (13) в ряд теории возмущений по некоторой константе g:

$$\begin{aligned} G^+ - G^- &= A_0 + gA_1 + g^2A_2 + \dots , \\ \Sigma^C - \Sigma^+ &= gB_1 + g^2B_1 + \dots . \end{aligned}$$

Тогда (13) будет иметь вид

$$g \int\limits_{t_2}^{\infty} dt_3 \int d^3r_3 A_0B_1 + g^2 \int\limits_{t_2}^{\infty} dt_3 \int d^3r_3\left[A_0B_2 + 2A_1B_1\right] + \dots = 0. \quad (14)$$

Каждое слагаемое в (I4) равно нулю по отдельности:

$$\int\limits_{t_2}^{\infty} dt_3 \int d^3r_3 A_0 B_1 = 0,$$
$$\cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \qquad (I5)$$
$$\int\limits_{t_2}^{\infty} dt_3 \int d^3r_3 (A_0 B_n + nA_1 B_{n-1} + \ldots) = 0.$$
$$\cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot$$

Далее доказательство соотношения (9) проведем методом индукции.

I. Покажем, что при $t_2 > t_1$ $B_1 = 0$. Для этого подействуем на первое соотношение (I5) оператором $G_0^{-1}(2)$:

$$0 = \int d^3r_3 \left[B_1(G_0^- - G_0^+)\right]_{t_2=t_3} + \int d3B_1 G_0^{-1}(G_0^- - G_0^+) = B_1(1,2).$$

Здесь были использованы соотношения (II), а также то, что для одновременных функций $G_0^-(\bar{x},t) - G_0^+(\bar{y},t) = \delta(\bar{x} - \bar{y})$.

2. Пусть $B_n(1,2) = 0$ для всех $n \leqslant N$ при $t_2 > t_1$. Докажем, что тогда $B_{N+1}(1,2) = 0$. Рассмотрим $(N + 1)$-ое соотношение (I5). С учетом сделанного предположения оно будет иметь вид:

$$\int\limits_{t_2}^{\infty} dt_3 \int d^3r_3 B_{N+1}(1,3)\left[G_0^-(3,2) - G_0^+(3,2)\right] = 0.$$

Повторяя рассуждения части I доказательства, докажем утверждение 2.

Соотношение (9) доказано. Аналогично можно показать, что при $t_1 > t_2$

$$\Sigma^C(1,2) = \Sigma^-(1,2). \qquad (I6)$$

Соотношения (9) и (I6) определяют Σ^C через $\Sigma^{\pm}$ только при $t_1 \neq t_2$ и требуют доопределения при $t_1 = t_2$. Очевидно, что Σ^C вносит ненулевой вклад в уравнение Дайсона (5) при $t_1 = t_2$, только если $\lim\limits_{t_1 \to t_2} \Sigma^C(1,2) \backsim \delta(t_1 - t_2)$. Поэтому следует исключить из Σ^C части, пропорциональные $\delta(t_1 - t_2)$ и учесть их отдельно:

$$\Sigma^C(1,2) = \Phi^C(r_1, r_2; t_1)\delta(t_1 - t_2) + \Sigma_r^C(1,2), \qquad (I7)$$

где $\Sigma_r^C(1,2)$ не имеет особенности при $t_1 = t_2$; для нее выполняется соотношение, аналогичное (7):

$$\Sigma^C_r(1,2) = \theta(t_1 - t_2)\Sigma^-(1,2) + \theta(t_2 - t_1)\Sigma^+(1,2), \qquad (18)$$

а Φ^C учитывает вклады в Σ^C двух типов:

 и ,

если V берется без учета запаздывания ($V(1,2) \sim \delta(t_1 - t_2)$). Легко показать, что Φ^C в кинетическом уравнении учитывает самосогласованную и обменную энергии. Соотношение для $\tilde{\Sigma}^C$, аналогичное (9), может быть доказано таким же образом.

В заключение автор выражает признательность Л. В. Келдышу и А. В. Виноградову за полезные обсуждения.

Поступила в редакцию
22 октября 1979 г.

Литература

1. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ, 47, 1515 (1964).