СПЕКТРАЛЬНЕ ЗОБРАЖЕННЯ СТАТИСТИЧНОГО ОПЕРАТОРА І ТЕМПЕРАТУРНИХ ФУНКЦІЙ ҐРІНА

М. Ваврух, С. Слободян
Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра астрофізики
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна
(Отримано 21 березня 2003 р.)

Спектральне зображення статистичного оператора, запропоноване раніше для моделі електронної рідини, узагальнено для однорідних систем ферміонів чи бозонів з багаточастинковими взаємодіями, а також для електрон–фононної моделі. Спектральне зображення функцій Ґріна базисних систем (частинок чи фононів) дає змогу формалізувати обчислення сум за частотами і спрощує процедуру розрахунку діяграм теорії збурень.

Ключові слова: S-матриця, температурні функції Ґріна, модель електронної рідини, модель ферміонів (бозонів) з багаточастинковимим взаємодіями, електрон–фононна модель.

PACS number(s): 05.30.Fk

I. ВСТУП

Як відомо, при розрахунках термодинамічних характеристик моделей квантових систем багатьох взаємодіючих частинок широко використовують теорію збурень у термінах температурних функцій Ґріна. Труднощі техніки Мацубари [1] з її координатним зображенням функцій Ґріна усунуто переходом до спектрального (імпульсно-частотного) представлення в роботах [2,3] (див. також [1]). У статтях [4,5] запропоновано спектральне зображення S-матриці моделі електронної рідини з метою розрахунку статистичної суми базисним методом, що приводить до теорії збурень у термінах n-частинкових кореляційних функцій базисної системи — моделі, термодинамічні й кореляційні функції якої відомі або ж можуть бути легко розраховані. Однак спосіб обчислення сум за частотами в цьому підході недостатньо формалізований, що часто створює практичні труднощі. Спектральне зображення S-матриці робіт [4,5] в цій статті узагальнено для систем ферміонів та бозонів з багаточастинковими локальними взаємодіями, а також для електрон–фононної моделі.

II. СПЕКТРАЛЬНЕ ЗОБРАЖЕННЯ СТАТИСТИЧНОГО ОПЕРАТОРА КВАНТОВИХ СИСТЕМ

Розгляньмо статистичну суму однорідної моделі ферміонів чи бозонів у великому канонічному ансамблі

$$Z(\mu) = \mathrm{Sp}\left\{\exp\left[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}\right]\right\}, \tag{1}$$

де $\hat{H}$ — гамільтоніян системи, $\hat{N}$ — оператор числа частинок, μ — змінна хемічного потенціялу, β — обернена температура.

У зображенні вторинного квантування на базисі плоских хвиль

$$\begin{aligned} &\hat{H} - \mu\hat{N} = \hat{H}_\mu + \hat{V}, \\ &\hat{H}_\mu = \sum_p (\varepsilon_p - \mu)\, C_p^+ C_p, \\ &\hat{V} = \sum_{n\geq 2} (n!)^{-1}\, V^{1-n} \\ &\times \sum_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n} \delta_{\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n,0}\, \upsilon_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)\, \hat{I}_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n) \end{aligned} \tag{2}$$

де $\upsilon_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)$ — зображення Фур'є потенціялу n-частинкової взаємодії,

$$\hat{I}_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n) = \sum_{p_1,\ldots,p_n} C^+_{p_1,\mathbf{q}_1}\cdots C^+_{p_n,\mathbf{q}_n} C_{p_n}\cdots C_{p_1}. \tag{3}$$

У формулах (2), (3) для компактности запису використано такі позначення:

$$C_p = \begin{cases} a_{\mathbf{k},s} & \text{для ферміонів, } p = (\mathbf{k}, s), \\ b_{\mathbf{k}} & \text{для бозонів, } p = \mathbf{k}, \end{cases} \tag{4}$$

$\mathbf{k}$ — хвильовий вектор, s — спінова змінна;

$$C_{p,\mathbf{q}} = \begin{cases} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s} & \text{для ферміонів,} \\ b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} & \text{для бозонів;} \end{cases} \tag{5}$$

а також $\varepsilon_p = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$, V — об'єм системи.

Модельну систему з гамільтоніяном $\hat{H}_\mu$ використаємо як базисну, застосовуючи у зв'язку з цим зображення взаємодії у статистичному операторі

$$\exp\left[-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})\right]=\exp\left[-\beta\hat{H}_\mu\right]\hat{S},$$

$$\hat{S}=\tilde{T}\exp\left\{-\int\limits_0^\beta\hat{V}(\beta')d\beta'\right\},$$

$$\hat{V}\left(\beta'\right)=\sum_{n\geq 2}(n!)^{-1}V^{1-n}\sum_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n}\delta_{\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n,0}\upsilon_n\left(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n\right)\hat{\rho}_{\mathbf{q}_1}\left(\beta'\right)\hat{\rho}_{\mathbf{q}_2}\left(\beta'\right)\ldots\hat{\rho}_{\mathbf{q}_n}\left(\beta'\right), \tag{6}$$

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}}(\beta')=\sum_p C^+_{p,\mathbf{q}}(\beta')C_p(\beta').$$

Тут уведено оператори у представленні взаємодії

$$C_p(\beta')=\exp\left[\beta'\hat{H}_\mu\right]C_p\exp\left[-\beta'\hat{H}_\mu\right], \tag{7}$$

а $\tilde{T}$ є узагальненим символом упорядкування операторів $C_p(\beta')$, який має такі властивості:

$$\tilde{T}\left\{C_{p_1}(\beta_1)C^+_{p_2}(\beta_2)\right\}=\left\{\begin{array}{ll} C_{p_1}(\beta_1)C^+_{p_2}(\beta_2), & \beta_1>\beta_2,\\ \mp C^+_{p_2}(\beta_2)C_{p_1}(\beta_1), & \beta_1=\beta_2,\\ \mp C^+_{p_2}(\beta_2)C_{p_1}(\beta_1), & \beta_1<\beta_2,\end{array}\right. \tag{8}$$

де верхні знаки відповідають ферміонам, а нижні — бозонам. Наявністю умови $\beta_1=\beta_2$ символ $\tilde{T}$ відрізняється від звичайного символу впорядкування T_τ [1], але саме завдяки цій умові оператор $\hat{V}(\beta')$ зображається як сума добутків $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}(\beta')$.

Уведемо дві системи функцій змінної β'

$$\psi_\nu(\beta')=\beta^{-1/2}\exp(-i\nu\beta') \tag{9}$$

на інтервалі $0\leq\beta'\leq\beta$ при частотах $\nu=(2n+1)\pi\beta^{-1}$ або $\nu=2n\pi\beta^{-1}$ $(n=0,\pm1,\pm2,\ldots)$. Обидві системи функцій (9) задовольняють умови ортогональности та повноти,

$$\begin{array}{l}\int\limits_0^\beta d\beta'\psi^*_{\nu_1}(\beta')\psi_{\nu_2}(\beta')=\delta_{\nu_1,\nu_2},\\ \sum\limits_\nu\psi^*_\nu(\beta_1)\psi_\nu(\beta_2)=\delta(\beta_1-\beta_2),\end{array} \tag{10}$$

а також очевидну умову

$$\begin{array}{l}\int\limits_0^\beta\psi^*_{\nu_1}(\beta')\ldots\psi^*_{\nu_n}(\beta')\psi_{\nu_{n+1}}(\beta')\ldots\psi_{\nu_{n+m}}(\beta')\,d\beta'\\ \quad=\beta^{1-\frac{1}{2}(n+m)}\delta_{\nu_1+\ldots+\nu_n,\nu_{n+1}+\ldots+\nu_{n+m}},\end{array} \tag{11}$$

де $\delta_{a,b}$ — символ Кронекера, $\delta(a-b)$ — дельта-функція Дірака. Щоб перейти до спектрального зображення, запишемо S-матрицю в еквівалентній формі

$$\begin{array}{l}\hat{S}=\tilde{T}\exp\left\{-\sum\limits_{n\geq2}(n!)^{-1}V^{1-n}\sum\limits_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n}\upsilon_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)\sum\limits_{p_1,\ldots,p_n}\int\limits_0^\beta d\beta'\int\limits_0^\beta\ldots\int\limits_0^\beta\right.\\ \quad\left.\times\prod\limits_{i=1}^{2n}d\beta_i\delta(\beta'-\beta_i)C^+_{p_1,\mathbf{q}_1}(\beta_1)C_{p_1}(\beta_2)\times\ldots\times C^+_{p_n,\mathbf{q}_n}(\beta_{2n-1})C_{p_n}(\beta_{2n})\right\}.\end{array} \tag{12}$$

Скористаємось зображенням δ-функцій через функції $\psi_\nu(\beta')$, згідно з умовою повноти (див. (10)), і проінтеґруємо за змінною β', від якої оператори $C_p(\beta_i)$ не залежать. Уводячи суперпозицію операторів

$$C_p(\nu)=\int\limits_0^\beta C_p(\beta_i)\psi^*_{\nu_i}(\beta_i)d\beta_i, \tag{13}$$

згідно з умовою (11), зобразимо S-матрицю у вигляді експоненти від поліноміяльної форми:

$$\begin{aligned}&\hat{S} = \tilde{T}\hat{S}_\nu\\ &\hat{S}_\nu = \exp\left\{-\sum_{n\geq 2}(n!)^{-1}(\beta V)^{1-n}\sum_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n}\upsilon_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)\delta_{\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n,0}\right.\\ &\quad\left.\times\sum_{\omega_1,\ldots,\omega_n}\delta_{\omega_1+\ldots+\omega_n,0}\hat{\rho}_{\mathbf{q}_1,\omega_1}\hat{\rho}_{\mathbf{q}_2,\omega_2}\ldots\hat{\rho}_{\mathbf{q}_n,\omega_n}\right\},\end{aligned} \tag{14}$$

де кожна ω_i є різницею двох частот і через це є частотою Бозе–Мацубари ($\omega_i = 2\pi n\beta^{-1}$) як для ферміонів, так і для бозонів, а

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q},\omega} = \sum_{p,\nu} C^+_{p,\mathbf{q}}(\nu+\omega)C_p(\nu) \tag{15}$$

є спектральним зображенням оператора густини частинок у змінних "хвильовий вектор — частота Бозе–Мацубари".

Як ще один приклад розгляньмо статистичну суму електрон–фононної моделі з гамільтоніяном, що є сумою гамільтоніяна Фреліха (див. [6]) та оператора міжелектронної взаємодії за законом Кулона:

$$\begin{aligned}&\hat{H} = \left\{\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ph}} + \hat{V}_{\text{ep}}\right\} + \hat{V}_{\text{ee}},\\ &\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},s}\varepsilon_k a^+_{\mathbf{k},s}a_{\mathbf{k},s};\\ &\hat{H}_{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{q}}\hbar\omega_q(b^+_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2});\\ &\hat{V}_{\text{ee}} = \frac{1}{2V}\sum_{q\neq 0}V_q\hat{I}_2(\mathbf{q},-\mathbf{q}),\ \hat{V}_q = 4\pi e^2 q^{-2};\\ &\hat{V}_{\text{ep}} = i\sum_{\mathbf{q}}D_{\mathbf{q}}\left\{b_{\mathbf{q}}\hat{\rho}_{\mathbf{q}} - b^+_{\mathbf{q}}\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}\right\},\end{aligned} \tag{16}$$

де

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \equiv \sum_{\mathbf{k},s} a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}a_{\mathbf{k},s} - \tag{17}$$

зображення Фур'є оператора електронної густини, $D_{\mathbf{q}}$ — функція електрон–фононного зв'язку, $a^+_{\mathbf{k},s}, a_{\mathbf{k},s}$ — оператори народження і знищення електронів у станах з хвильовим вектором $\mathbf{k}$ і спіном s, а $b^+_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}}$ — такі ж оператори для фононів, що підлягають статистиці Бозе.

Переходячи до зображення взаємодії у статистичному операторі, за базисну систему виберемо модель, яка складається із двох підсистем — вільних електронів та невзаємодіючих фононів,

$$\hat{H}_\mu = \hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{H}_{\text{ph}}, \tag{18}$$

і введемо, за аналогією до (13), суперпозицію операторів вторинного квантування в зображенні взаємодії як для електронів, так і для фононів, а саме:

$$\begin{aligned}&a_{\mathbf{k},s}(\nu) = \int_0^\beta a_{\mathbf{k},s}(\beta_i)\psi^*_\nu(\beta_i)d\beta_i,\\ &b_x \equiv b_{\mathbf{q}}(\omega) = \int_0^\beta b_{\mathbf{q}}(\beta_i)\psi^*_\omega(\beta_i)d\beta_i.\end{aligned} \tag{19}$$

У частотному зображенні S-матриця має такий вигляд:

$$\begin{aligned}&\hat{S}_\nu = \exp\left\{-(2\beta V)^{-1}\sum_{\mathbf{q},\omega}V_q\hat{\rho}_x\hat{\rho}_{-x} - i\beta^{-1/2}\sum_{\mathbf{q},\omega}D_q\left[b_x\hat{\rho}_x - b^+_x\hat{\rho}_{-x}\right]\right\};\\ &\hat{\rho}_x \equiv \sum_{\mathbf{k},s;\nu}a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}(\nu+\omega)a_{\mathbf{k},s}(\nu);\\ &\omega = 2\pi n\beta^{-1};\ \nu = (2n+)\pi\beta^{-1}.\end{aligned} \tag{20}$$

III. СПЕКТРАЛЬНЕ ЗОБРАЖЕННЯ ФУНКЦІЙ ҐРІНА

Уведені формулами (13), (19) оператори $c_p(\nu)$, $a_{\mathbf{k},s}(\nu)$, $b_{\mathbf{q}}(\omega)$ не мають самостійного змісту і є лише зручними позначеннями. Однак такого змісту їм можна надати, встановивши правила обчислення середніх під знаком хронологічного впорядкування.

З цією метою розгляньмо одночастинкові функції Ґріна базисних систем:

$$-\left\langle \tilde{T}\left\{C_{p_1}(\beta_1)C^{+}_{p_2}(\beta_2)\right\}\right\rangle_0 = \delta_{p_1,p_2}G_{p_1}(\beta_1-\beta_2) \tag{21}$$

для ферміонів і бозонів,

$$-\left\langle \tilde{T}\left\{b_{\mathbf{q}_1}(\beta_1)b^{+}_{\mathbf{q}_2}(\beta_2)\right\}\right\rangle_0 = \delta_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2}G_{\mathbf{q}_1}(\beta_1-\beta_2\,) \tag{22}$$

— для фононів. Наявність символу $\tilde{T}$ у (21), (22) порушує рівноправність змінних β_1 і β_2. Щоб відобразити цей факт, будемо розглядати відповідні функції Ґріна як границі:

$$\begin{aligned} G_p(\beta_1-\beta_2\,) &= \lim_{\delta\to+0} G_p(\beta_1-(\beta_2+\delta)\,),\\ G_{\mathbf{q}}(\beta_1-\beta_2\,) &= \lim_{\delta\to+0} G_{\mathbf{q}}(\beta_1-(\beta_2+\delta)\,). \end{aligned} \tag{23}$$

Наступний розгляд проведемо на прикладі функцій Ґріна для бозонів чи ферміонів, оскільки фононні функції $G_{\mathbf{q}}(\beta_1-\beta_2)$ у нашому підході є лише частковим випадком функцій Ґріна для бозонів. Застосуймо білінійний розклад функцій $G_p(\beta_1-\beta_2-\delta)$ за функціями (9):

$$G_p(\beta_1-\beta_2\,-\delta) = \sum_{\nu} G_p(\nu\,)\psi_\nu(\beta_1)\psi^*_\nu(\beta_2+\delta) = \beta^{-1}\sum_{\nu} G_p(\nu\,)e^{i\nu\delta}e^{-i\nu\tau}, \tag{24}$$

де $\tau=\beta_1-\beta_2$. Оскільки $-\beta\le\tau\le\beta$, звідси знаходимо, що

$$G_p(\nu\,) = \frac{1}{2}\int\limits_{-\beta}^{\beta} G_p(\tau\,)e^{i\nu\tau}d\tau. \tag{25}$$

Врахуємо далі, що, згідно з означеннями (8), (21),

$$G_p(\tau) = \zeta(\tau)\left\{\begin{array}{rl} \pm n_p & \text{при } \tau\le 0,\\ -(1\mp n_p) & \text{при } \tau>0, \end{array}\right. \tag{26}$$

де

$$n_p = \left\{\exp\left[\beta(\varepsilon_p-\mu)\right]\pm 1\right\}^{-1} \tag{27}$$

— розподіл частинок за енерґіями, а $\zeta(\tau)=\exp\left[-\tau(\varepsilon_p-\mu)\right]$. Верхній знак у формулах (26), (27) відповідає ферміонам, а нижній — бозонам. З формули (25) знаходимо:

$$\begin{aligned} G_p(\nu) &= \pm\frac{1}{2}n_p\int\limits_{-\beta}^{0}\zeta(\tau)e^{i\nu\tau}d\tau - \frac{1}{2}(1\mp n_p)\lim_{\Delta\to+0}\int\limits_{\Delta}^{\beta}\zeta(\tau)e^{i\nu\tau}d\tau\\ &= \pm\frac{1}{2}n_p\frac{1-e^{-\beta(i\nu-\varepsilon_p+\mu)}}{i\nu-\varepsilon_p+\mu} - \frac{1}{2}(1\mp n_p)\lim_{\Delta\to+0}\frac{e^{(i\nu-\varepsilon_p+\mu)\beta}-e^{(i\nu-\varepsilon_p+\mu)\Delta}}{i\nu-\varepsilon_p+\mu}\\ &= \left\{\pm\frac{1}{2}n_p(1-e^{-\beta(i\nu-\varepsilon_p+\mu)}) - \frac{1}{2}(1\mp n_p)(e^{(i\nu-\varepsilon_p+\mu)\beta}-1)\right\}\frac{1}{i\nu-\varepsilon_p+\mu}\\ &-\frac{1}{2}(1\mp n_p)\lim_{\Delta\to+0}\left\{1-e^{(i\nu-\varepsilon_p+\mu)\Delta}\right\}. \end{aligned} \tag{28}$$

Згідно з останньою формулою, маємо таке зображення функцій $G_p(\nu)$ для ферміонів:

$$G_{\mathbf{k},s}(\nu)=\begin{cases}(i\nu-\varepsilon_p+\mu)^{-1} & \text{при } \nu=(2n+1)\pi/\beta,\\ 0 & \text{при } \nu=2n\pi/\beta;\end{cases}\tag{29}$$

для бозонів

$$G_{\mathbf{k}}=\begin{cases}0 & \text{при } \nu=(2n+1)\pi/\beta,\\ (i\nu-\varepsilon_p+\mu)^{-1} & \text{при } \nu=2\pi n/\beta.\end{cases}\tag{30}$$

Цілком аналогічно для фононів

$$G_{\mathbf{q}}(\omega)=(i\omega-\hbar\omega_{\mathbf{q}})^{-1}\,\text{при }\omega=2\pi n\beta^{-1}.\tag{31}$$

Підставляючи (29), (30) у формулу (24), одержуємо співвідношення (26), у яких фігурує не $\zeta(\tau)$, а $\zeta(\tau-\delta)$. Розрахунок таких сум за частотами ґрунтується на використанні стандартних формул (див. напр. [7]). Для непарних частот

$$\beta^{-1}\sum_{\nu}G_{k,s}(\nu)e^{i\nu x}=F_k+J_k,$$

$$F_k=-\frac{2\alpha_k}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\cos\left[(2n+1)\,t\right]}{(2n+1)^2+\alpha_k^2}-\frac{1}{2}\text{sh}\left[\left(\frac{\pi}{2}-t\right)\alpha_k\right]\text{sech}\left(\frac{\pi}{2}\alpha_k\right),$$

$$J_k=\frac{2}{\pi}\text{sign }x\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n+1)\sin\left[(2n+1)\,t\right]}{(2\text{n}+1)^2+\alpha_k^2}=\frac{1}{2}\text{sign }x\,\text{ch}\left[\left(\frac{\pi}{2}-t\right)\alpha_k\right]\text{sech}\left(\frac{\pi}{2}\alpha_k\right),\tag{32}$$

де $t\equiv\frac{\pi}{\beta}\left|x\right|,\alpha_k=\frac{\beta}{\pi}\left(\varepsilon_k-\mu\right)$. За аналогією до (32), розраховуємо суму за частотами Бозе–Мацубари:

$$L_{\pm}=\beta^{-1}\lim_{\delta\to+0}\sum_{\nu}\left(i\nu+E\right)^{-1}\exp\left(\pm i\nu\delta\right)=\pm\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\text{cth}\left(\frac{\beta E}{2}\right)=\left\{\begin{array}{r}1+n_E\\ n_E\end{array}\right\},$$

де $n_E=\{\exp(\beta E)-1\}^{-1}$ — розподіл Бозе для частинок з енерґіями E. У часткових випадках маємо такі вирази для сум за частотами від функцій Ґріна:

$$\begin{aligned}\beta^{-1}\lim_{\delta\to+0}\sum_{\nu}G_p(\nu)e^{i\nu\delta}&=\pm n_p,\\ \beta^{-1}\lim_{\delta\to+0}\sum_{\omega}G_{\mathbf{q}}(\omega)e^{i\omega\delta}&=-n_{\mathbf{q}},\end{aligned}\tag{33}$$

де $n_{\mathbf{q}}=\{\exp(\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}})-1\}^{-1}$ — розподіл за енерґіями для фононів.

Завдяки лінійності співвідношень (13), (19) теорема Віка справедлива також щодо операторів $c_p(\nu),b_{\mathbf{q}}(\omega)$ — середнє значення $\tilde{T}$-добутку будь-якого числа операторів зводиться до всіх можливих попарних середніх, зокрема у випадку частинок до

$$\Gamma_{p_1,p_2}(\nu_1,\nu_2)=-\left\langle\tilde{T}\left\{c_{p_1}(\nu_1)\,c^{+}_{p_2}(\nu_2)\right\}\right\rangle_o.\tag{34}$$

Згідно зі співвідношеннями (13), (21), (24),

$$\Gamma_{p_1,p_2}(\nu_1,\nu_2)=\delta_{p_1,p_2}\int_0^{\beta}\int_0^{\beta}d\beta_1 d\beta_2\,\psi^{*}_{\nu_1}(\beta_1)\,\psi_{\nu_2}(\beta_2)\,G_{p_1}(\beta_1-\beta_2)$$

$$= \delta_{p_1,p_2} \lim_{\delta\to+0} \int\limits_0^\beta \int\limits_0^\beta d\beta_1 d\beta_2\, \psi^*_{\nu_1}(\beta_1)\, \psi_{\nu_2}(\beta_2)\, G_{p_1}(\beta_1-\beta_2-\delta)$$

$$= \delta_{p_1,p_2}\delta_{\nu_1,\nu_2} \lim_{\delta\to+0} \left\{ \sum_\nu G_p(\nu)\, e^{i\nu\delta}\delta_{\nu,\nu_1} \right\}. \tag{35}$$

Як найпростіший приклад використання одержаних співвідношень розгляньмо обчислення внеску S-матриці у формі (14) у термодинамічний потенціал фермі-системи в першому порядку теорії збурень:

$$\begin{aligned} &\Omega_1 = \sum_{n\geq 2} (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n} \upsilon_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)\delta_{\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n,0}\mu^0_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n),\\ &\mu^0_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n) = \beta^{1-n} \lim_{\delta_1,\ldots,\delta_n\to+0} \sum_{\omega_1,\ldots,\omega_2} \delta_{\omega_1+\ldots+\omega_n,0}\mu^0_n(x_1,\ldots,x_n), \end{aligned} \tag{36}$$

де

$$\mu^0_n(x_1,\ldots,x_n) = \beta^{-1}\left\langle \tilde{T}\left\{\hat\rho_{x_1}\hat\rho_{x_2}\ldots\hat\rho_{x_n}\right\}\right\rangle_0^{\text{зв}}$$

$$= (-1)^{n-1}\beta^{-1}(n-1)! \sum_{\mathbf{k},s}\sum_\nu G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,s}(\nu+\omega_1) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,s}(\nu+\omega_1+\omega_2)\times\ldots$$

$$\times G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n,s}(\nu+\omega_1+\ldots+\omega_n)\exp\left\{i\left[\delta_1(\nu+\omega_1)+\delta_2(\nu+\omega_1+\omega_2)+\ldots+\delta_n(\nu+\omega_1+\ldots+\omega_n)\right]\right\} \tag{37}$$

— спектральне зображення n-частинкової кореляційної функції базисної системи (моделі ферміонів без взаємодії); $x_i \equiv (\mathbf{q}_i,\omega_i)$ [8]. Символ $\langle\ldots\rangle_0^{\text{зв}}$ означає зв'язне середнє від добутку n операторів $\hat\rho_x$, яке не розпадається на добуток середніх від меншого числа таких операторів.

Розрахунок $\mu^0_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)$ можна здійснити двома шляхами: або спершу обчислити суму за частотою ν, розбиваючи добуток функцій Ґріна у формулі (37) на прості множники і користуючись правилом (35), а потім обчислити суми за частотами ω_i згідно з правилом (33); або ж у формулах (36), (37) перейти від сум за частотами ν, $\omega_1,\omega_2,\ldots,\omega_n$ до незалежних частот ν, $\nu_1=\nu+\omega_1, \nu_2=\nu+\omega_1+\omega_2,\ldots,\nu_n=\nu+\omega_1+\ldots+\omega_n$ і використати правило (33). Другим способом одержуємо для $\mu^0_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)$ такий вираз:

$$\mu^0_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n) = (-1)^{n-1}(n-1)!\sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,s}n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,s}\ldots n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n,s}. \tag{38}$$

Використовуючи перший спосіб, одержуємо зображення для структурних факторів у такій формі:

$$\begin{aligned} &\mu^0_2(\mathbf{q},-\mathbf{q}) = -\beta^{-1}\lim_{\delta\to+0}\sum_\omega \mu^0_2(x,-x);\\ &\mu^0_2(x,-x) = 2\mathrm{Re}\sum_{\mathbf{k},s}(i\omega+\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^{-1}\left\{n_{\mathbf{k},s}e^{i\omega\delta}-n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}e^{-i\omega\delta}\right\};\\ &\mu^0_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2) = \beta^{-2}\\ &\quad\times\lim_{\delta_1,\delta_2\to+0}\sum_{\omega_1,\omega_2}\left\{\gamma_3(x_1,-x_2)+\gamma_3(x_2,x_1+x_2)+\gamma_3(-x_1,-x_1-x_2)\right\};\\ &\gamma_3(x_1,x_2)\equiv 2\mathrm{Re}\sum_{\mathbf{k},s}n_{\mathbf{k},s}(i\omega_1+\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1})^{-1}\times(i\omega_2+\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2})^{-1}e^{i\delta_1\omega_1}e^{i\delta_2\omega_2}, \end{aligned} \tag{39}$$

і т. д. Обчислюючи суми (39) за частотами Бозе–Мацубари за правилом (33), знову приходимо до виразу (39).

Використання множників $\exp(i\delta_j\nu)$ і перехід до границі $\delta_j\to+0$ після обчислення сум за частотою обов'язкові в тих випадках, коли число функцій Ґріна збігається із числом незалежних сум за частотами. Якщо ж число незалежних сум менше від числа функцій Ґріна, то деякі переходи до границі $\delta_j\to+0$ можливі до обчислення сум за відповідними частотами. Наприклад, при розрахунку внесків сукупности поляризаційних діяграм n-го порядку теорії збурень ($n\geq 2$), породжених двочастинковою взаємодією $\upsilon_2(\mathbf{q},-\mathbf{q})$ і пропорційних $\left\{\mu^0_2(x,-x)\right\}^n$ (незалежні частоти $\nu_1,\nu_2,\ldots,\nu_n$ і ω), слід скористатися правилом (35) для розрахунку $\mu^0_2(x,-x)$, після чого перейти до границі $\delta\to+0$ у $\mu^0_2(x,-x)$ перед обчисленням суми за частотою ω (після попереднього підсумовування ряду діяграм типу геометричної прогресії за степенями множника $\upsilon_2(\mathbf{q},-\mathbf{q})\mu^0_2(x,-x)$).

Ще однією ілюстрацією може бути розрахунок поляризаційного оператора фермі-систем у наближенні чотиричастинкових кореляцій базисної системи при врахуванні двочастинкових взаємодій:

$$\mathrm{M}\,(x,-x)=\mu_2^0(x,-x)+\Delta\mathrm{M}\,(x,-x),$$
$$\Delta\mathrm{M}\,(x,-x)=-\frac{1}{2\beta V}\lim_{\delta_i\to+0}\sum_{\mathbf{q}_1,\omega_1}\upsilon_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)\varepsilon^{-1}(x_1)\mu_4^0(x,-x,x_1,-x_1), \tag{40}$$
$$\varepsilon(x_1)=1+\frac{1}{V}\upsilon_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)\mu_2^0(x_1,-x_1),$$

де

$$\mu_4^0(x,-x,x_1,-x_1)=\beta^{-1}\left\langle\tilde{T}\left\{\hat\rho_x\hat\rho_{-x}\hat\rho_{x_1}\hat\rho_{-x_1}\right\}\right\rangle_0^{\text{зв}}=-2\beta^{-1}\mathrm{Re}\sum_{\mathbf{k},s}\sum_{\nu}G_{\mathbf{k},s}(\nu)G_{\mathbf{k+q},s}(\nu+\omega)G_{\mathbf{k+q}_1,s}(\nu+\omega_1)$$
$$\times\left\{2G_{\mathbf{k},s}(\nu)e^{i\delta_3\nu}+G_{\mathbf{k+q+q}_1,s}(\nu+\omega+\omega_1)e^{i\delta_4(\nu+\omega+\omega_1)}\right\}e^{i\delta_3\nu}e^{i\delta_1(\nu+\omega)}e^{i\delta_2(\nu+\omega_1)}. \tag{41}$$

Перший доданок фігурної дужки відповідає діяграмі власної енерґії, а другий — обмінній ($x\equiv(\mathbf{q},\omega)$, $x_1\equiv(\mathbf{q}_1,\omega_1)$). Щоб скористатися формулою (33) для обчислення суми за частотою ω_1 у формулі (40), необхідно зобразити $\varepsilon^{-1}(x_1)$ у вигляді двох доданків,

$$\frac{1}{\varepsilon(x_1)}=1-\frac{\varepsilon(x_1)-1}{\varepsilon(x_1)}, \tag{42}$$

записуючи $\Delta M(x,-x)$ як суму двох членів. При розрахунку першого з них перейдемо до незалежних частот $\nu,\nu_1=\nu+\omega_1$, скористаємось формулою (33) і перейдемо до границі $\delta_j\to+0$:

$$\Delta M_1(x,-x)=\frac{\hbar^2}{m\beta V}\sum_{\mathbf{q}_1}(\mathbf{q},\mathbf{q}_1)\upsilon_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)\sum_{\mathbf{k},s}(n_{\mathbf{k},s}-n_{\mathbf{k+q},s})(n_{\mathbf{k+q}_1,s}-n_{\mathbf{k+q}_1+\mathbf{q},s})$$
$$\times\,\mathrm{Re}\left\{\left[i\omega+\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k+q}}\right]^{-2}\left[i\omega+\varepsilon_{\mathbf{k+q}_1}-\varepsilon_{\mathbf{k+q}_1+\mathbf{q}}\right]^{-1}\right\}.$$

Для простих потенціялів при $T=0$ K цей вираз зводиться до двовимірного інтеґрала шляхом переходу від змінної $\mathbf{q}_1$ до $\mathbf{k}_1=\mathbf{k}+\mathbf{q}_1$ та наступним інтеґруванням за векторами $\mathbf{k},\mathbf{k}_1$ у циліндричній системі координат (див. [9]). Доданок $\Delta M_1(x,-x)$ відповідає наближенню Ґелдарта–Тейлора, які розрахували лінійну за потенціялом поправку до поляризаційного оператора моделі електронного газу у статичній границі [10].

Для визначення другого доданка, $\Delta M_2(x,-x)$ слід спочатку розрахувати $\mu_4^0(x,-x,x_1,-x_1)$, виконуючи підсумовування за частотою ν у формулі (41) за правилом (33) і переходячи до границі $\delta_i\to+0$. Обчислення суми за вектором $\mathbf{k}$ виконуємо в аналітичній формі, у результаті чого одержуємо зображення

$$\mu_4^0(x,-x,x_1,-x_1)=\frac{3N}{(2\varepsilon_F)^3}I_4(q,q_1;t;u,u_1), \tag{43}$$

де N — число частинок у системі; $\varepsilon_{\mathrm{F}}=\dfrac{\hbar^2k_{\mathrm{F}}^2}{2m}$ — енерґія Фермі; $I_4(\ldots)$ — безрозмірна функція безрозмірних арґументів — $q\equiv|\mathbf{q}|\,k_{\mathrm{F}}^{-1},q_1\equiv|\mathbf{q}_1|\,k_{\mathrm{F}}^{-1},t=\cos(\widehat{\mathbf{q},\mathbf{q}_1}),u=\omega(2\varepsilon_{\mathrm{F}}q)^{-1},u_1=\omega_1(2\varepsilon_{\mathrm{F}}q_1)^{-1}$ (див. [5]). Наступний розрахунок доданка

$$\Delta M_2(x,-x)=\frac{1}{2\beta V}\sum_{\mathbf{q}_1,\omega_1}\upsilon_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)\frac{\varepsilon(x_1)-1}{\varepsilon(x_1)}\mu_4^0(x,-x,x_1,-x_1) \tag{44}$$

для абсолютного нуля температури зводиться до тривимірного інтеґрала за змінними q_1,u_1,t, що виконується чисельно.

IV. ВИСНОВКИ

Використання спектрального зображення статистичного оператора квантових систем — ферміонів, бозонів або квазічастинок — значно спрощує діяграмну техніку теорії збурень для розрахунку термодинамічних та структурних функцій і надає базисному підходу універсальних можливостей.

Запропоноване спектральне зображення функцій Ґріна базисних систем у формі (23), (24) та (29)–(31), (35) дає змогу формалізувати визначення діяграм теорії збурень і усуває труднощі обчислення сум за частотами, які характерні для звичайної техніки [1].

[1] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Физматгиз, Москва, 1962).
[2] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Журн. эксп. теор. физ. **36**, 900 (1959).
[3] Е. С. Фрадкин, Журн. эксп. теор. физ. **36**, 1286 (1959).
[4] М. В. Ваврух, Укр. фіз. журн. **36**, 296 (1991).
[5] M. Vavrukh, T. Krokhmalskii, Phys. Status Solidi (b) **168**, 519 (1991).
[6] *Теория сверхпроводимости.* Сб. статей. Под ред. Н. Н. Боголюбова (ИЛ., Москва, 1960).
[7] А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды* (Наука, Москва, 1981).
[8] М. В. Ваврух, Теор. мат. физ. **50**, 438 (1982).
[9] М. В. Ваврух, В. Н. Паславський, Н. Л. Тишко, Журн. фіз. досл. **4**, 21 (2000).
[10] D. J. W. Geldart, R. Taylor, Can. J. Phys. **48**, 155 (1970).

THE SPECTRAL REPRESENTATION OF STATISTICAL OPERATOR AND GREEN'S FUNCTIONS AT THE FINITE TEMPERATURE

M. V. Vavrukh, S. B. Slobodyan
The Ivan Franko National University of Lviv, Department for Astrophysics,
8 Kyryla and Mefodia Str., Lviv, UA-79005, Ukraine

The spectral representation of the statistical operator for the electron liquid model was suggested previosly by one of autors. This approach is generalized for homogeneous Fermi or Bose systems with many-particle interactions, as well as for the electron–phonon model. The spectral representation of Green's functions reference systems (particle or phonon) was proposed. It allows to formalize the calculation of the sum over the frequency and simplify the procedure of calculation of the pertubation theory diagram.