

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.



Р4 - 4919

Н.М. Плакида

РАСЦЕПЛЕНИЕ  
ДВУХВРЕМЕННЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА  
И ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

P4 - 4919

Н.М. Плакида

**РАСЦЕПЛЕНИЕ  
ДВУХВРЕМЕННЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА  
И ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА**

Направлено в журнал "Теоретическая  
и математическая физика"

**Объединенный институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА**

В последние годы в квантовой статистической физике получил широкое распространение метод температурных функций Грина, как двухвременных (запаздывающих и опережающих) <sup>/1/</sup>, так и причинных <sup>/2/</sup>. При этом благодаря простым аналитическим свойствам двухвременных функций Грина удается относительно просто найти решение различных задач в методе уравнений движения для функций Грина, хотя используемая обычно в этом методе процедура расщепления многочастичных функций Грина не является вполне однозначной. С другой стороны, в методе причинных функций Грина диаграммная техника позволяет провести суммирование определенного класса диаграмм и оценить точность сделанных приближений, хотя вычисления в этом методе носят более сложный характер.

Нам представляется возможным при решении целого ряда задач объединить преимущества обоих методов таким образом, чтобы, пользуясь более простым методом уравнений движения для двухвременных функций Грина, контролировать процедуру расщепления соответствующим диаграммным анализом. Суть этого подхода основана на том факте, что запаздывающие, опережающие и причинные двухвременные функции Грина имеют одни и те же уравнения движения и отличаются лишь аналити-

ческими свойствами, которые не влияют на процедуру расщепления. Поэтому в результате определенного расщепления мы всегда можем получить уравнение Дайсона в явном виде для причинных функций Грина, диаграммный анализ которого позволяет однозначно определить точность данного расщепления.

В настоящей работе мы продемонстрируем этот подход на примере ангармонического кристалла, где учитываются все порядки ангармонизма, и поэтому задача с точки зрения диаграммной техники представляется достаточно сложной. Отметим, что подобный подход использовался ранее, например, при рассмотрении электрон-фононной системы /3/, при исследовании динамики кристалла с примесями /4/. Для ангармонического кристалла с учетом низших порядков ангармонизма результаты обоих методов сравнивались в работе /5/.

### 1. Уравнения движения для функций Грина,

#### Неприводимые функции Грина

Рассмотрим ангармонический кристалл, состоящий из  $N$  атомов массы  $M$ , гамильтониан которого запишем в виде

$$H = \sum_{\ell} \frac{\vec{P}_{\ell}^2}{2M} + U(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N), \quad (1)$$

где  $\vec{P}_{\ell}$  и  $\vec{R}_{\ell} = \vec{\ell} + \vec{u}_{\ell}$  — операторы импульса и координаты атомов, расположенных в узлах решетки  $\vec{\ell} = \langle \vec{R}_{\ell} \rangle$ . Среднее  $\langle \dots \rangle$  вычисляется по равновесному состоянию кристалла при данной температуре  $\theta = kT$ . Разлагая потенциальную энергию кристалла  $U$  в бесконечный ряд по смещениям атомов  $\vec{u}_{\ell}$  и переходя к обычным операторам рождения  $a_k^+$  и уничтожения  $a_k$  фононов, запишем гамильтониан (1) в виде /6/:

$$H = \sum_k \frac{\omega_k}{4} B_k^+ B_k + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_n(k_1 \dots k_n) A_{k_1} \dots A_{k_n}, \quad (2)$$

где введены более удобные операторы

$$B_k = a_k - a_{-k}^+ = -B_{-k}^+$$

$$A_k = a_k + a_{-k}^+ = A_{-k}^+$$

и

$$V_n(k_1 \dots k_n) = \sum_{\ell_1 \dots \ell_n} e^{i k_1 \vec{\ell}_1 + \dots + i k_n \vec{\ell}_n} \frac{(e_{k_1} \vec{V}_{\ell_1})}{\sqrt{2MN \omega_{k_1}}} \dots \frac{(e_{k_n} \vec{V}_{\ell_n})}{\sqrt{2MN \omega_{k_n}}} U(\vec{\ell}_1 \dots \vec{\ell}_n). \quad (3)$$

где  $k = (\vec{k}, j)$ ,  $-k = (-\vec{k}, j)$  — квазиимпульс,  $j$  — номер моды фонона. Векторы поляризации  $\vec{e}_k$  и частоты фононов  $\omega_k$  будут определены ниже.

Введем двухвременные функции Грина

$$G_{kk'}(t-t') = \langle\langle A_k(t); A_{k'}^+(t') \rangle\rangle, \quad (4)$$

где мы пользуемся обозначениями Зубарева /1/: двойными угловыми скобками обозначаем усреднение по ансамблю Гиббса с полным гамильтонианом (2) коммутатора от операторов в представлении Гейзенберга и умножение на  $-i\theta(t-t')$  для запаздывающих,  $i\theta(t'-t)$  для опережающих и  $-i\Gamma$  для причинных функций Грина. Фурье-представление по времени для функций Грина запишем в виде

$$G_{kk'}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_{kk'}(\omega). \quad (5)$$

Учитывая правила коммутации для операторов  $A_k$ ,  $B_k$ , которые легко получить из их определения, получаем следующее уравнение движения для функций Грина (4):

$$i^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{kk}(t-t') = 2\omega_k \delta_{kk} \delta(t-t') +$$

$$+ 2\omega_k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\dots n} V_n(-k, 1\dots n) \langle\langle A_1(t) \dots A_n(t); A_k^+(t') \rangle\rangle, \quad (6)$$

где  $l \equiv (k, j_1)$  и т.д.

Воспользуемся далее хорошо известным в диаграммной технике приемом введения неприводимых функций Грина. Это позволит нам отсуммировать бесконечную последовательность диаграмм самосогласованного поля и тем самым точно учесть перенормировку фононных энергий и вершин  $V_n$  в самосогласованном фононном поле.

Неприводимой ( $ir$ )  $n$ -частичной функцией Грина будем называть функцию, которая не может быть сведена путем расщепления к функциям Грина более низкого порядка, что на диаграммном языке означает, что неприводимая функция Грина не содержит собственно энергетических частей в приближении самосогласованного поля. Это определение с учетом симметрии функции Грина по перестановке коммутирующих между собой операторов  $A_1, \dots, A_n$  запишем в виде:

$$\langle\langle A_1(t) \dots A_n(t); A_k^+(t') \rangle\rangle^{ir} \equiv \langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle^{ir} =$$

$$= \langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle - \sum_{m=1}^{n-2} C_n^{n-m} \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 \dots A_m | \rangle\rangle^{ir}, \quad (7)$$

где  $C_n^{n-m} = C_n^m = n! / m! (n-m)!$ . Определение (7) может быть переписано в виде тождества для разложения произвольной функции Грина по неприводимым функциям Грина, которые, в свою очередь, определяются из (7). В результате получаем формальное точное разложение:

$$\langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle = \sum_{m=1}^n C_n^m \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 \dots A_m | \rangle\rangle^{ir} =$$

$$= C_n^1 \langle A_2 \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 | \rangle\rangle + C_n^2 \langle A_3 \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 A_2 | \rangle\rangle +$$

$$+ C_n^3 \langle A_4 \dots A_n \rangle \{ \langle\langle A_1 A_2 A_3 | \rangle\rangle - C_3^1 \langle A_2 A_3 \rangle \langle\langle A_1 | \rangle\rangle \} + \dots \quad (8)$$

$$+ \{ \langle\langle A_1 \dots A_n | \rangle\rangle - \sum_{m=1}^{n-2} C_n^m \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle\langle A_1 \dots A_m | \rangle\rangle^{ir} \},$$

где мы учли, что согласно определению равновесных положений атомов  $\langle A_i \rangle = 0$ . Чтобы сделать это разложение замкнутым, необходимо провести подобное же разложение для корреляционных функций. Для этого можно воспользоваться спектральной теоремой, связывающей корреляционные функции и функции Грина <sup>1/1</sup>. Переходя к фурье-разложению по времени в (8), определим спектральные плотности корреляционных функций, интегрируя которые по частотам, получим формальное точное разложение и для корреляционных функций:

$$\langle A_1 \dots A_n \rangle = \sum_{m=1}^{n-1} C_{n-1}^m \langle A_{m+2} \dots A_n \rangle \{ \langle A_1 \dots A_{m+1} \rangle^{ir} \} =$$

$$= C_{n-1}^1 \langle A_3 \dots A_n \rangle \langle A_1 A_2 \rangle + C_{n-1}^2 \langle A_4 \dots A_n \rangle \langle A_1 A_2 A_3 \rangle +$$

$$+ C_{n-1}^3 \langle A_5 \dots A_n \rangle \{ \langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle - C_3^1 \langle A_3 A_4 \rangle \langle A_1 A_2 \rangle \} + \dots$$

$$+ \{ \langle A_1 \dots A_n \rangle - \sum_{m=1}^{n-3} C_{n-1}^m \langle A_{m+2} \dots A_n \rangle [ \langle A_1 \dots A_{m+1} \rangle^{ir} ] \},$$

где мы ввели  $A_k^+ = A_{n+1}$  и произвели затем очевидную замену индексов по сравнению с (8).

Разложение (8) позволяет провести частичное суммирование вкладов в уравнении (6). Рассмотрим вклад произвольного  $m$ -го члена разложения из (8) в уравнении (6):

$$\sum_{n=m}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots m} \sum_{m+1 \dots n} V_{n+1}(-k, 1 \dots m, m+1 \dots n) C_n^m \langle A_{m+1} \dots A_n \rangle \langle A_1 \dots A_m \rangle^{ir} =$$

$$= \frac{1}{m!} \sum_{1 \dots m} \langle A_1 \dots A_m \rangle^{ir} \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1 \dots n'} V_{m+1+n'}(-k, 1 \dots m, 1' \dots n') \langle A_1 \dots A_{n'} \rangle =$$

$$= \frac{1}{m!} \sum_{1 \dots m} \tilde{V}_{m+1}(-k, 1 \dots m) \langle A_1 \dots A_m \rangle^{ir},$$

где введена ренормированная вершина, которая с учетом (3) имеет вид

$$\tilde{V}_n(1 \dots n) = \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1' \dots n'} V_{n+n'}(1 \dots n, 1' \dots n') \langle A_1 \dots A_{n'} \rangle =$$

$$= \sum_{\vec{\ell}_1 \dots \vec{\ell}_n} e^{i k_1 \vec{\ell}_1 + \dots + i k_n \vec{\ell}_n} \frac{(\vec{e}_{k_1} \vec{V}_{\vec{\ell}_1})}{\sqrt{2MN \omega_{k_1}}} \dots \frac{(\vec{e}_{k_n} \vec{V}_{\vec{\ell}_n})}{\sqrt{2MN \omega_{k_n}}} \langle U(\vec{R}_1 \dots \vec{R}_N) \rangle. \quad (11)$$

Проводя подобное суммирование по  $n$  в каждом члене разложения в (8) и учитывая, что  $m \leq n < \infty$ , запишем уравнение (6) для фурье-компонент функций Грина в виде

$$\omega^2 G_{kk}(\omega) = 2\omega_k \delta_{kk} + 2\omega_k \sum_{k_1} \tilde{V}_2(-k, k_1) G_{k_1 k}(\omega) +$$

$$+ 2\omega_k \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \tilde{V}_{n+1}(-k, 1 \dots n) G_{1 \dots n k}^{ir}(\omega), \quad (12)$$

где мы выписали отдельно член с  $\tilde{V}_2$ , который определяет энергию фононов в приближении самосогласованного фононного поля. Действительно, выбирая частоты фононов  $\omega_k$  и векторы поляризации  $e_k$  согласно уравнению

$$M e_{kj}^{\alpha} \omega_{kj}^2 = \sum_{\vec{\ell} \beta} e_{kj}^{\beta} e^{-i k(\vec{\ell} - \vec{m})} \nabla_{\vec{\ell}}^{\alpha} \nabla_{\vec{m}}^{\beta} \langle U(\vec{R}_1 \dots \vec{R}_N) \rangle |_{\vec{m}=0}, \quad (13)$$

функцию  $\tilde{V}_2$  приводим к диагональному виду:

$$2\omega_k \tilde{V}_2(-k, k_1) = \omega_k^2 \delta_{kk_1}. \quad (14)$$

После этого уравнение (12) можно записать в виде уравнения Дайсона

$$G_{kk}(\omega) = G_k^0(\omega) \delta_{kk} + G_k^0(\omega) \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \tilde{V}_{n+1}(-k, 1 \dots n) G_{1 \dots n k}^{ir}(\omega), \quad (15)$$

где нулевая функция Грина

$$G_k^0(\omega) = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2} \quad (16)$$

описывает распространение "самосогласованного" фонона без затухания, а неприводимые функции Грина с  $n \geq 2$  описывают возможные процессы неупругого рассеяния, приводящие к затуханию и дополнительной перенормировке частоты самосогласованных фононов.

Полученное точное уравнение Дайсона (15) для причинных функций Грина может быть изображено графически с помощью обычных правил диаграммной техники. В схематическом виде эта запись приведена на рис. 1, где точные функции Грина изображены жирными линиями с круж-

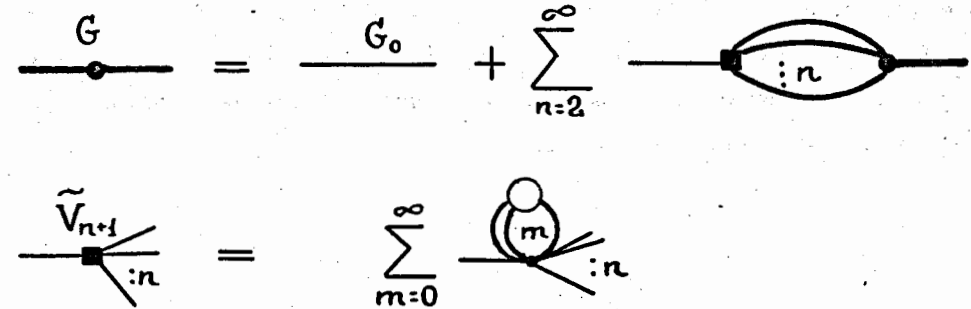


Рис. 1.

ком, нулевые – тонкими линиями. Уравнение (11) для перенормированной вершины  $V_n$ , изображенной квадратиком, схематически приведено во второй строке через исходную вершину, изображенную в виде точки, и  $m$ -частичную корреляционную функцию, изображенную светлым кружком с  $m$  жирными линиями.

## 2. Приближенное определение функций Грина

Как видно, уравнение (15) оказывается незамкнутым, так как одностичная функция Грина связана с  $n$ -частичной ( $n \geq 2$ ) неприводимой функцией Грина, которая по определению не может быть упрощена. Можно, однако, предположить, что неприводимые функции Грина более высокого порядка, описывающие корреляцию большого числа фононов, быстро затухают, и поэтому можно оборвать бесконечный ряд в (15) на некотором значении  $n$ . В результате система уравнений (9), (11), (15) может быть решена с той же точностью. Заметим, что разложение по неприводимым функциям Грина по существу соответствует известному кумулянтному разложению для производящей функции и широко используется в классической статистической механике системы  $N$  частиц /7/. При этом обычно учет уже нескольких первых членов разложения приводит к достаточно точному описанию системы.

В настоящем изложении, следуя работе /8/, мы рассмотрим только простейшие двухфононные неупругие процессы рассеяния, которые описываются двухчастичной функцией

$$G_{pp',k'}^{(1)}(\omega) = \langle\langle A_p A_{p'} | A_k^+ \rangle\rangle_{\omega} \quad (17a)$$

и связанными с ней функциями Грина



$$G_{pp',k}^{(2)}(\omega) = \ll B_p A_{p'} | A_k^+ \gg_{\omega}, \quad (17b)$$

$$G_{pp',k}^{(3)}(\omega) = \ll B_p B_{p'} | A_k^+ \gg_{\omega}. \quad (17c)$$

Функции (17) описывают все возможные процессы рождения и уничтожения фононов при взаимодействии трех фононов. Выписывая уравнения движения для этих функций и ограничиваясь в правых частях уравнений только одно- и двухчастичными функциями Грина, получим замкнутую систему трех уравнений. Пользуясь результатами работы /6/, здесь мы приведем только окончательный результат для функции Грина (17a)

$$G_{pp',k}^{(1)}(\omega) = 2 F(p, p', \omega) \sum_{k_1} \tilde{V}_3(-p, -p', k_1) G_{k_1 k}(\omega), \quad (18)$$

где

$$F(p, p', \omega) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(N_p + N_{p'}) (\omega_p + \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2} - \frac{(N_p - N_{p'}) (\omega_p - \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2} \right\} \quad (19)$$

и  $N_p = \langle A_p^+ A_p \rangle$ . Подставляя (18) в уравнение (15), где учитывается лишь первый член разложения с  $n=2$ , получим замкнутое уравнение Дайсона:

$$G_{kk}(\omega) = G_k^0(\omega) \delta_{kk} + G_k^0(\omega) \sum_{k_1} \Pi_{kk_1}(\omega) G_{k_1 k}(\omega), \quad (20)$$

где массовый оператор одночастичной функции Грина имеет вид:

$$\Pi_{kk_1}(\omega) = \sum_{pp'} \tilde{V}_3(-k, p, p') \tilde{V}_3(-p', -p, k_1) F(p, p', \omega). \quad (21)$$



Теперь мы можем записать уравнение Дайсона в графическом виде. В схематическом виде эта запись приведена на рис. 2, где использованы те же обозначения, что и на рис. 1. При этом для того чтобы получить

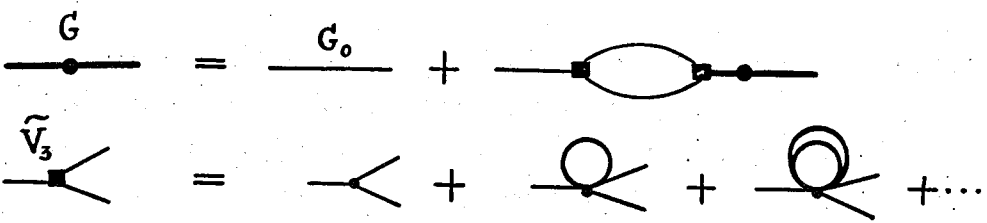


Рис. 2.

ное уравнение было замкнуто и самосогласовано, при определении корреляционной функции в (11) для вершинных частей  $\tilde{V}_n$  достаточно удерживать лишь первый член в разложении (9), который сводится в этом случае к произведению функций типа  $\langle A_k^+ A_k \rangle$ . Последние вычисляются согласно спектральной теореме по одночастичной функции Грина:

$$\langle A_k^+, A_k \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \operatorname{cth} \frac{\omega}{2\theta} [-\operatorname{Im} G_{kk}(\omega + i\epsilon)]. \quad (22)$$

Выражение для вершины  $\tilde{V}_3$  в этом приближении схематически приведено во второй строке на рис. 2.

Таким образом, диаграммный анализ позволяет нам установить однозначное соответствие результатов, основанных на расщеплении, с результатами, полученными на основе диаграммной техники (см. /8-10/). Как следует из рис. 1, введение неприводимых функций Грина эквивалент-

но суммированию бесконечного ряда диаграмм самосогласованного поля, а удержание только двухчастичных функций в (15), согласно рис. 2, эквивалентно учету простейшей петлевой диаграммы с двумя фононами в промежуточном состоянии при вычислении массового оператора функции Грина. Пользуясь результатами диаграммного анализа, мы можем, кроме того, оценить точность сделанных приближений. Соответствующие оценки показывают, что вклад последующих членов в разложении (15) будет достаточно мал, если мало относительное смещение атомов. (Гидродинамический предел для функции Грина (4)  $k \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$  требует особого рассмотрения). Как показано в работе /11/, на основе принятых здесь приближений для трехмерной модели кристалла эта величина оказывается малой вплоть до температуры неустойчивости решетки, и поэтому вкладом последующих членов в (15) с достаточной степенью точности можно пренебречь.

Сделаем несколько общих замечаний. Предложенный в этой работе метод может быть также полезен при исследовании других систем, где диаграммная техника является достаточно сложной, например, в квантовой теории магнетизма. Этот метод особенно удобен при рассмотрении неравновесных процессов, поскольку в этом случае на основании формул Кубо кинетические коэффициенты выражаются через достаточно сложные двухчастичные (запаздывающие) функции Грина /1/. Последние удается относительно просто определить в методе уравнений движения, причем сделанные расщепления можно оценить на основе диаграммного анализа, подобного вышеприведенному. Вычисление же кинетических коэффициентов непосредственно с помощью причинных функций Грина требует применения особенно сложной диаграммной техники.

В заключение мне бы хотелось поблагодарить Д.Н. Зубарева за полезные обсуждения.

## Л и т е р а т у р а

1. Н.Н. Боголюбов, С.В. Тябликов. ДАН СССР, 126, 53 (1959);  
Д.Н.Зубарев. УФН 71, 71 (1960); В.Л.Бонч-Бруевич, С.В. Тябликов.  
Метод функций Грина в статистической механике, Ф-М., Москва, 1961.
2. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой  
теории поля в статистической физике, Физматгиз, Москва, 1962.
3. А.И. Касиян, В.А. Москаленко. Известия АН Молд. ССР, №10 (88),  
27, (1961).
4. И.П. Дзюб. ФТТ 6, 1866, 3691 (1964); Ю.М. Каган. Физика кристал-  
лов с дефектами, том. 2, АН Груз. ССР, Тбилиси, 1966.
5. P. Gluck. Proc.Phys.Soc., 92, 192 (1967).
6. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. phys.stat.sol. 33, 103 (1969).
7. Н.Н. Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической  
физике. Гостехиздат, Москва, 1946.
8. Ph.N. Choquard. The Anharmonic Crystal, Benjamin, New-  
York, 1967.
9. H. Horner. Z.Phys., 205, 72 (1967).
10. W. F.Götze. Phys.Rev., 156, 951 (1967).
11. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. Сообщение ОИЯИ Р4-4575, Дубна, 1969.

Рукопись поступила в издательский отдел  
6 февраля 1970 года.