

Техника Келдыша

Основные понятия

Матрица плотности

$$q_i \in [0, 1], \quad \text{and} \quad \sum_i q_i = 1 \quad \text{-вероятности квантовых состояний}$$

$$\langle A \rangle = \sum_i q_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle \quad \text{-Среднее квантовой величины}$$

$$\langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \text{tr} \left[A | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \right]$$

$$\langle A \rangle = \sum_i q_i \text{tr} \left[A | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \right] = \text{tr} \left\{ A \sum_i q_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \right\}$$

$$\rho = \sum_i q_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i |$$

-матрица плотности

$$\langle A \rangle = \text{tr}(A\rho)$$

Многочастичный гамильтониан

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad \text{Гамильтониан взаимодействующих электронов}$$

Можно переписать этот гамильтониан в представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + \\ & + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \iint \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \end{aligned}$$

В импульсном представлении:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

Эволюция многочастичных систем

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi \quad | \Psi(t) \rangle = S(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} S(t, t_0) = H S(t, t_0) \quad S(t_0, t_0) = 1$$

Уравнение движения пропагатора многочастичной системы

$$I(t) = \langle \Psi(t) | \hat{I} | \Psi(t) \rangle = \langle 0 | S(t_0, t) \hat{I} S(t, t_0) | 0 \rangle$$

$$S^+(t, t_0) = S^{-1}(t, t_0) = S(t_0, t) \quad S(t, t_0) = S(t, t_1) S(t_1, t_0)$$

Квантовая статистика

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \quad \longrightarrow \quad i\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

$$\rho(t) = S(t, t_0)\rho(t_0)S^+(t, t_0)$$

$$\begin{aligned} I(t) = \langle \hat{I} \rangle &\equiv Sp[\hat{\rho}(t)\hat{I}] = Sp[S(t, t_0)\rho(t_0)S^+(t, t_0)\hat{I}] \\ &= Sp[\rho(t_0)S^+(t, t_0)\hat{I}S(t, t_0)] \end{aligned}$$

$$Sp[\hat{\rho}(t)\hat{I}] = Sp[\hat{\rho}_0\hat{I}(t)]$$

Среднее значение
наблюдаемой величины

Представление взаимодействия

$$H = H_0 + V$$

Можно убрать тривиальную зависимость от времени:

$$\hat{a}_p^+(t) = e^{i\varepsilon_p t} \hat{a}_p^+ \quad \hat{a}_p(t) = e^{-i\varepsilon_p t} \hat{a}_p$$

$$Sp[\hat{\rho}(t)\hat{I}] = Sp[\rho_0 S^+(t, t_0) \hat{I} S(t, t_0)] = Sp[\rho_0 U^+(t, t_0) \hat{I}(t) U(t, t_0)]$$

$$U(t, t_0) = e^{iH_0 t} S(t, t_0)$$

**Новый оператор
эволюции**

$$\hat{I}(t) = e^{iH_0 t} \hat{I} e^{-iH_0 t}$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = e^{iH_0 t} (H - H_0) e^{-iH_0 t} U(t, t_0)$$

**Уравнение движения для
оператора эволюции**

Представление взаимодействия

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \hat{V}(t) U(t, t_0)$$

$$\hat{V}(t) = e^{iH_0 t} \hat{V} e^{-iH_0 t}$$

$$U(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 + i^2 \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}(t_2) dt_2 + \dots$$

$$\int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}(t_2) dt_2 = \frac{1}{2} T \left[\int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^t \hat{V}(t_2) dt_2 \right] \text{ оператор хронологического упорядочения}$$

$$U(t, t_0) = T \exp \left[-i \int_{t_0}^t \hat{V}(t') dt' \right]$$

Формальная запись
оператора эволюции через
оператор хронологического
упорядочения

Обратный оператор эволюции

$$-i \frac{\partial}{\partial t} U^+(t, t_0) = U^+(t, t_0) \hat{V}(t)$$

$$U^+(t, t_0) = 1 + i \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 + i^2 \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) + \dots$$

Сравните....

$$U(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 + i^2 \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}(t_2) dt_2 + \dots$$

$$U^+(t, t_0) = \tilde{T} \exp \left[+i \int_{t_0}^t \hat{V}(t') dt' \right]$$

Формальная запись
оператора эволюции через
обратный оператор
хронологического
упорядочения

Многочастичная функция Грина

$$i\hbar G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \frac{\langle \psi_H^0 | T [\hat{\psi}_H(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_H^\dagger(\mathbf{r}'t')] | \psi_H^0 \rangle}{\langle \psi_H^0 | \psi_H^0 \rangle}$$

Используя свойства оператора хронологического упорядочения:

$$\begin{aligned} i\hbar G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') &= \frac{\langle \psi_H^0 | \hat{\psi}_H(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_H^\dagger(\mathbf{r}'t') | \psi_H^0 \rangle}{\langle \psi_H^0 | \psi_H^0 \rangle} & t \geq t', \\ &= - \frac{\langle \psi_H^0 | \hat{\psi}_H^\dagger(\mathbf{r}'t') \hat{\psi}_H(\mathbf{r}t) | \psi_H^0 \rangle}{\langle \psi_H^0 | \psi_H^0 \rangle} & t < t'. \end{aligned}$$

Корреляционные функции

Коррелятор $t > t'$

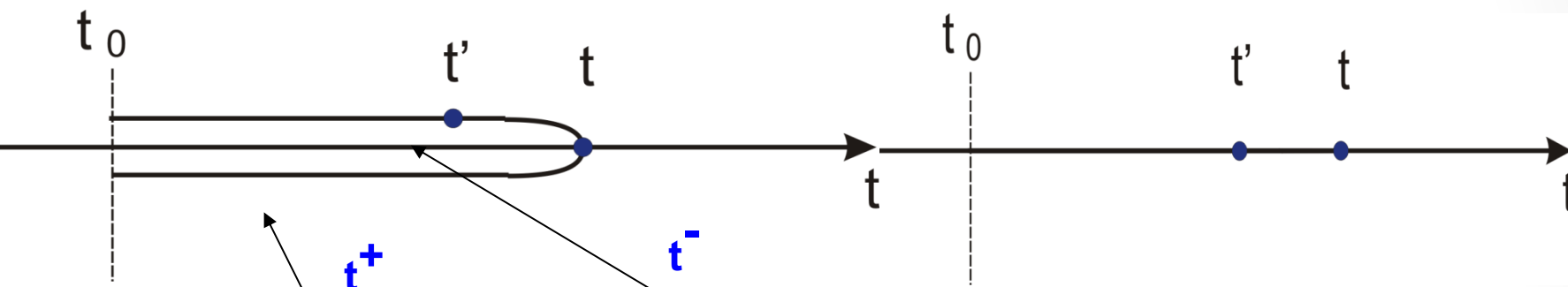
$$\begin{aligned}\langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle &= Sp[\rho_0 S^+(t, t_0) \hat{A} S(t, t') \hat{B} S(t', t_0)] \\ &= Sp[\rho_0 U^+(t, t_0) \hat{A}(t) U(t, t') \hat{B}(t') U(t', t_0)]\end{aligned}$$

То же для T - упорядочения $\langle T \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle$

$$T \hat{A}(t) \hat{B}(t') = \theta(t - t') \hat{A}(t) \hat{B}(t') \mp \theta(t' - t) \hat{B}(t') \hat{A}(t)$$

$$\langle T \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle = Sp[\rho_0 U^+(t, t_0) T \{ U(t, t_0) \hat{A}(t) \hat{B}(t') \}]$$

Контур Келдыша



$$Sp[\rho_0 \tilde{T} \exp \left[+i \int_{t_0}^t \hat{V}(t_2) dt_2 \right] T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^t \hat{V}(t_1) dt_1 \right] \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right\}]$$

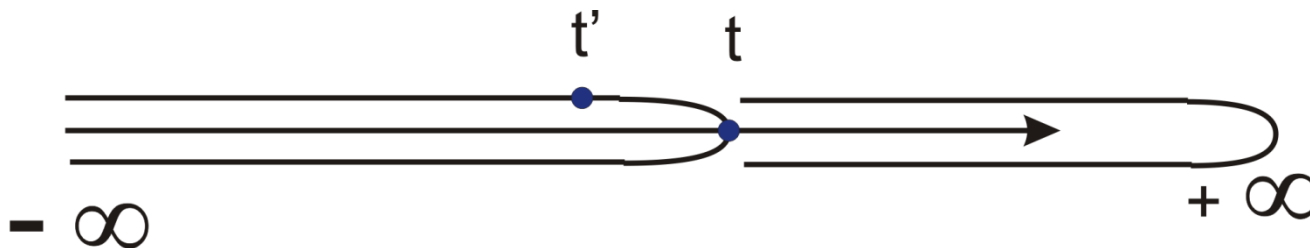
Контур Келдыша

Группы операторов стоят в определенном порядке

$$Sp[\rho_0 T_C \left\{ \exp \left[-i \int_C \hat{V}(t_c) dt_c \right] \hat{A}(t^-) \hat{B}(t'^-) \right\}]$$

Если $t_0 \rightarrow -\infty$

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \rangle &= Sp[\rho_0 S^+(t, -\infty) S^+(+\infty, t) S(+\infty, t) \hat{A} S(t, t') \hat{B} S(t', -\infty)] = \\ &= Sp[\rho_0 U^+(+\infty, -\infty) T\{U(+\infty, -\infty) \hat{A}(t) \hat{B}(t')\}] \end{aligned}$$



Функции Грина свободных частиц

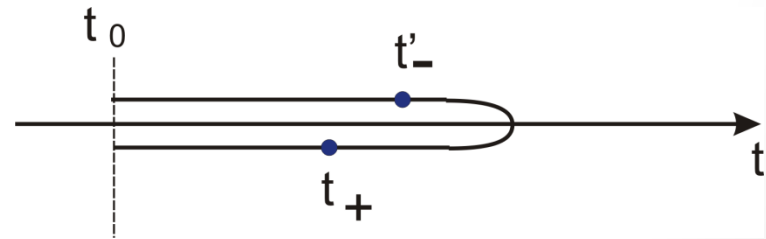
$$\hat{G}(r, t_\alpha; r' t'_\beta) = -i \langle T_c \Psi(\vec{r}, t_\alpha) \Psi^\dagger(\vec{r}', t'_\beta) \rangle = \hat{G}^{\alpha, \beta}(r, t; r' t')$$

$$\Psi(r, t) = \sum_p \hat{a}_p(t) e^{ipr}$$

$$\hat{a}_p^+(t) = e^{i\varepsilon_p t} \hat{a}_p^+ \quad \hat{a}_p(t) = e^{-i\varepsilon_p t} \hat{a}_p$$

$$G^{+-}(rt, r't') = -i \langle \hat{\psi}(rt) \hat{\psi}^+(r't') \rangle$$

$$G^{-+}(rt, r't') = i \langle \hat{\psi}^+(r't') \hat{\psi}(rt) \rangle$$



Эти функции не упорядочены с точки зрения настоящего времени
Но упорядочены с точки зрения пути вдоль контура

Линейная зависимость функций Грина

$$\hat{G}_p^{-+} + \hat{G}_p^{+-} = \hat{G}_p^{--} + \hat{G}_p^{++}$$

$$\hat{G}_p^R = \hat{G}_p^{--} - \hat{G}_p^{-+}$$

$$\hat{G}_p^A = \hat{G}_p^{--} - \hat{G}_p^{+-}$$

$$\hat{G}_p^R(t, t') = -i \langle \hat{a}_p(t) \hat{a}_p^+(t') + \hat{a}_p^+(t') \hat{a}_p(t) \rangle \theta(t - t') = -ie^{-i\varepsilon_p(t-t')} \theta(t - t')$$

$$G^R(p, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(p) + i\delta}$$

$$G^{-+}(p, \omega) = 2\pi i n(\omega) \delta(\omega - \varepsilon(p)) = -2i n(\omega) \operatorname{Im} G^R(p, \omega)$$

Усреднение операторов

$$Sp \left\{ \rho_0 \tilde{T} \left[\frac{i^n}{n!} \iiint \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n) dt_1 dt_2 \dots dt_n \right] T \left[\hat{A}(t) \hat{B}(t') \frac{(-i)^m}{m!} \iiint \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_m) dt_1 dt_2 \dots dt_m \right] \right\}$$

Внешнее поле

$$\hat{V} = \int \Psi^+(r) U(r, t) \Psi(r) = \sum_p a_{p+q}^+ a_p U_q(t)$$

$$\hat{A} = a_p \quad \hat{B} = a_{p'}^+$$

Первый порядок

$$\hat{G}_p^{--}(t, t') = -i \langle T \hat{a}_p(t) \hat{a}_p^+(t') \rangle$$

$$-i \langle T a_p(t) a_{p'}^+(t') (-i) \int \sum_{p_1} a_{p_1+q}^+(t_1) U_q(t) a_{p_1}(t_1) dt_1 \rangle$$

$$-i \langle (+i) \tilde{T} \int \sum_{p_1} a_{p_1+q}^+(t_1) U_q(t) a_{p_1}(t_1) dt_1 T[a_p(t) a_{p'}^+(t')] \rangle$$

Представление Ларкина и Овчинникова

$$\hat{G}^R = \hat{G}^{--} - \hat{G}^{-+} = \hat{G}^{+-} - \hat{G}^{++}$$

$$\hat{G}^A = \hat{G}^{--} - \hat{G}^{+-} = \hat{G}^{-+} - \hat{G}^{++}$$

$$\hat{G}^K = \hat{G}^{-+} + \hat{G}^{+-} = \hat{G}^< + \hat{G}^>$$

$$\hat{G}^{\alpha,\beta} = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{-+} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix} \quad \hat{G} \Rightarrow L\hat{G}L^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & G^K \end{pmatrix}$$

$$\hat{G} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{G} \quad \hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix}$$