现代物理基础丛书 16

凝聚态物理的格林函数理论

王怀玉 著

科学出版社
www.sciencep.com

内 容 简 介

本书详细介绍了凝聚态物理中常用的单体格林函数和多体格林函数的基本理论.对于多体格林函数，介绍了费恩曼图形技术和运动方程法. 对格林函数在一些方面的应用做了介绍，主要是在弱耦合超导体、海森伯磁性系统和介观输运方面的应用.

本书对于概念的说明与公式的推导力求详尽、全面，内容由浅入深. 便于读者学习.读者需要具备量子力学和统计力学的基本知识.

本书可供凝聚态物理及相关领域的研究人员参考和作为大专院校的高年级学生或研究生的教学用书或参考书.

图书在版编目(CIP)数据

凝聚态物理的格林函数理论/王怀玉 著 —北京：科学出版社，2008
(现代物理基础丛书；16)
ISBN 978-7-03-020091-4

I. 凝… II. 王… III. 格林函数-应用-凝聚态-物理学 IV. O469

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008) 第 031076 号

责任编辑：胡 凯／责任校对：陈丽珠
责任印制：赵德静／封面设计：王 浩

科 学 出 版 社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

源海印刷有限责任公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2008 年 5 月第 一 版 开本：B5(720 × 1000)
2008 年 5 月第一次印刷 印张：31 1/2
印数：1—3 000 字数：602 000

定价：78.00 元
(如有印装质量问题，我社负责调换〈明辉〉)

前　言

格林函数方法是凝聚态物理中常用的方法，而且是一个强有力的工具. 可是国内出版的这方面的书籍很少，可以说是屈指可数. 作者认为现在再出一本这方面的书籍是有必要的.

本书先讲单体格林函数，再讲多体格林函数，因为前者也是实际的研究工作中经常用到的方法. 对于多体格林函数，我们介绍了费恩曼图展开技术和运动方程法. 在叙述了多体格林函数的基本理论之后，我们主要介绍了在磁学、超导和介观电荷输运研究方面的应用. 本书中关于磁性的内容写得比较多一些. 这有以下三个原因. 一是具有磁性的材料是信息存储的重要载体. 对材料基本磁性的研究有着重要的实际意义. 二是除了下面列出的参考文献 [1]，其他有关格林函数方法的书籍涉及磁性内容很少，而近年来用格林函数方法研究磁性有较大的进展，有必要在这方面做些稍微详细的介绍. 三是作者最近的研究工作主要是用格林函数方法研究磁性，对这方面比较熟悉. 对于超导体，因有些参考文献上介绍得比较详细，本书只涉及弱耦合超导体. 最后，介观输运是目前研究的热点，而且用非平衡态格林函数研究介观输运的工作越来越多. 本书最后一章给出了比较典型的例子.

本书的写作宗旨是力求把基本理论和基本概念讲细讲透，使读者容易接受. 作者尽可能地给出一些习题，以供读者进一步深化和扩展所学的内容.

在介绍格林函数的基础理论时，作者较多地参考以下参考文献：

[1] 蔡建华，龚昌德，姚希贤，等. 量子统计的格林函数理论 [M]. 北京: 科学出版社, 1982.

[2] 卫崇德，章立源，刘福绥. 固体物理中的格林函数方法 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1992.

[3] ECONOMOU E N. Green's Functions in Quantum Physics[M]. New York: Springer-Verlag, 1983.

[4] MAHAN G D. Many-Partical Physics[M]. New York: Plenum Press, 1981.

[5] 费特 A L, 瓦立克 J D. 多粒子系统的量子理论 [M]. 陈俊文，孙景李，梁昆淼，译. 北京: 科学出版社, 1984.

[6] LIFSHITZ E M, PITAEVSKII L P. Statistical Physics[M]. Course of Theoretical Physics: Vol. 9. Oxford: Pergamon Press, 1980.

本书中的前两部分主要参考上述文献 [3]. 由于上述文献可能在不止一个章节中被参考，因此书中不再专门指明在何处引用这些文献. 各章末尾列出的是在该章

内专门引用的参考文献.

本书注意与其他参考书、教科书的衔接. 所用符号尽量与有关参考书籍一致, 便于读者阅读参考文献.

书中对于外国人名, 如果已有常用的中文译名, 就用此中文译名, 并在正文中第一次出现时用括号标出原文. 另外一些外国人名则只写原文.

书中如有错误与疏漏, 敬请前辈、行家与读者批评指正.

苗青女士帮助绘制部分插图, 在此表示感谢.

王怀玉

2007 年 2 月谨识于清华园

目　录

第三部分 多体格林函数

第一部分

数学物理中的格林函数

(Green's Functions in Mathematical Physics)

第一章　不含时格林函数

§1.1　基 本 公 式

如果有一厄米算符 $\hat{L}(\boldsymbol{r})$, 它是空间坐标的函数, 则满足方程

$$[z-\hat{L}(\boldsymbol{r})]G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{1.1.1}$$

及一定的边界条件的解 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)$ 称为格林函数 (Green's function). $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 是狄拉克 δ 函数. 当宗量 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\neq 0$ 时, 函数值是 0, 当宗量 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'=0$ 时, 函数值是 ∞. 此处 $\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'$ 是在某个区域 V 内, 在 V 的表面 G 的值就是 G 所应当满足的边界条件. 这儿 z 是复数. $\hat{L}(\boldsymbol{r})$ 是一个不含时间的线性厄米算符. 它有一套本征值与本征函数:

$$\hat{L}(\boldsymbol{r})\varphi_n(\boldsymbol{r})=\lambda_n\varphi_n(\boldsymbol{r}) \tag{1.1.2}$$

这儿方程 (1.1.2) 与 (1.1.1) 式是在同一区域 V 内求解, 所以 $\varphi_n(\boldsymbol{r})$ 满足与 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)$ 在相同的边界上给出边界条件. 作为厄米算符的本征值, $\{\lambda_n\}$ 是一组实数, $\{\varphi_n(\boldsymbol{r})\}$ 是完备系. 为简单计, 还认为 $\{\varphi_n(\boldsymbol{r})\}$ 是正交归一的, 即

$$\int_V \varphi_n^*(\boldsymbol{r})\varphi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\delta_{nm} \tag{1.1.3}$$

本书中 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\mathrm{d}^d r$, 其中上标的 d 表示空间维数. 对于三维、二维和一维空间, $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 分别代表 d^3r、d^2r 和 $\mathrm{d}r$. $\{\varphi_n(\boldsymbol{r})\}$ 的完备性则意味着

$$\sum_n \varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}')=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{1.1.4}$$

注意这儿的下标 n 可以表示本征值 $\{\lambda_n\}$ 可能是一组分立值, 也可能是连续谱. 最一般的情况是, 有部分分立谱与部分连续谱 · 在这种情况下, (1.1.4) 式中的求和 $\sum\limits_n$ 写成 $\sum\limits_n{}'+\int\mathrm{d}n$ 其中 $\sum\limits_n{}'$ 表示对分立谱部分求和, 而 $\int\mathrm{d}n$ 表示对连续谱部分积分.

现在我们利用量子力学中的狄拉克 (Dirac) 符号. 将本征函数、厄米算符、格林函数写成脱离任何表象的形式 φ_n、$\hat{L}$、$G(z)$. 那么它们投到坐标表象中的形式为

$$\varphi_n(\boldsymbol{r})=\langle\boldsymbol{r}|\varphi_n\rangle \tag{1.1.5}$$

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')L(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\hat{L}|\boldsymbol{r}'\rangle \tag{1.1.6}$$

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z) = \langle \boldsymbol{r}|G(z)|\boldsymbol{r}'\rangle \tag{1.1.7}$$

常用的正交和完备性的条件是

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{1.1.8}$$

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}| = 1 \tag{1.1.9}$$

$G(z)$ 可看作是一个算符. 在纯算符的形式下, (1.1.1)~(1.1.4) 式可写成如下形式：

$$(z-\hat{L})G(z) = 1 \tag{1.1.10}$$

$$\hat{L}|\varphi_n\rangle = \lambda_n|\varphi_n\rangle \tag{1.1.11}$$

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{1.1.12}$$

$$\sum|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \tag{1.1.13}$$

将此四式写成 $\boldsymbol{r}$ 表象中的形式即为 (1.1.1)~(1.1.4) 式. 例如, 对于 (1.1.10) 式两边做 $\langle\boldsymbol{r}|$ 与 $|\boldsymbol{r}'\rangle$ 的矩阵元. 利用 (1.1.4) 式, 右边为 $\langle\boldsymbol{r}|1|\boldsymbol{r}'\rangle = \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, 见 (1.1.8) 式. 左边则插入 (1.1.9) 式.

$$\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{r}|(z-\hat{L})G(z)|\boldsymbol{r}'\rangle = \langle\boldsymbol{r}|(z-\hat{L})\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}''|\boldsymbol{r}''\rangle\langle\boldsymbol{r}''|G(z)|\boldsymbol{r}'\rangle\\ &=\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}''[z-\hat{L}(\boldsymbol{r}'')]\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')G(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}';z) = [z-\hat{L}(\boldsymbol{r})]G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)\end{aligned}$$

同样道理, 我们也可将 (1.1.10)~(1.1.13) 式写成 $\boldsymbol{k}$ 表象中的形式. 这时格林函数的变量是 $\boldsymbol{k}: G(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';z)$.

如果 z 取 L 的本征值之外的任何值, 即 $z \neq \{\lambda_n\}$, 则 (1.1.10) 式的解可以形式上写成

$$G(z) = \frac{1}{z-\hat{L}} \tag{1.1.14}$$

此式也表明格林函数 $G(z)$ 确实可以看作是一个算符. 利用 (1.1.13) 式,

$$G(z) = \frac{1}{z-\hat{L}}\sum|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \sum_n\frac{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}{z-\lambda_n} \tag{1.1.15}$$

我们已经利用了这样一个性质：如果一个厄米算符 $\hat{L}$ 的本征谱与本征函数分别为 $\{\lambda_n\}$ 和 $\{\varphi_n(\boldsymbol{r})\}$, 则函数 $F(\hat{L})$ 的本征值与本征函数为$\{F(\lambda_n)\}$与 $\{\varphi_n(\boldsymbol{r})\}$: $F(\hat{L})\varphi_n(\boldsymbol{r}) = F(\lambda_n)\varphi_n(\boldsymbol{r})$. 这里只要将函数 $F(\lambda_n)$ 作泰勒 (Taylor) 展开就很容易证得.

当 $z \to \infty$ 时,

$$G(z) = \lim_{z\to\infty} \frac{1}{z}\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \frac{1}{z} \tag{1.1.16}$$

考虑到可能有连续谱的情况, (1.1.15) 式应更一般地写成

$$G(z) = {\sum_n}' \frac{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}{z-\lambda_n} + \int \mathrm{d}n \frac{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}{z-\lambda_n}$$

求和号上的一撇表示只对分立本征值求和. 在坐标表象中,

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z) = {\sum_n}' \frac{\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}')}{z-\lambda_n} + \int \mathrm{d}n \frac{\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}')}{z-\lambda_n} \tag{1.1.17}$$

写成这一形式时, G 就不是个算符而是个函数了.

由于 $\hat{L}$ 是厄米算符, 本征值 $\{\lambda_n\}$ 都是实数. 因此, 如果 $\mathrm{Im}z \neq 0$, $z \neq \{\lambda_n\}$, 则函数 $G(z)$ 在除实轴上 $\hat{L}$ 的本征值以外的全复 z 平面上都是解析的. 在 $\hat{L}$ 的分立本征值处, 是 $G(z)$ 的一级极点. 反之: $G(z)$ 的一级极点给出 $\hat{L}$ 的分立本征值. 在 $\hat{L}$ 的连续谱 λ 处, 格林函数没有定义. 这时在 λ 所处实轴的上下两侧, 格林函数的侧极限 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda\pm \mathrm{i}0^+)$ 可能存在, 但这两个侧极限很可能不相等. 在这种情况下, 实 z 轴上连续谱的范围内格林函数不解析, 称为是格林函数的一条支割线. 我们定义格林函数的两个侧极限为

$$G^+(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda) = \lim_{\eta\to 0^+} G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda+\mathrm{i}\eta) = G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda+\mathrm{i}0^+) \tag{1.1.18}$$

$$G^-(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda) = \lim_{\eta\to 0^+} G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda-\mathrm{i}\eta) = G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda-\mathrm{i}0^+) \tag{1.1.19}$$

其中 0^+ 表示趋于零的正无穷小量. 这是一种简略写法. 对于第二种情况, 也可写成 $\lambda - \mathrm{i}0^+ = \lambda + \mathrm{i}0^-$, 0^- 表示趋于零的负无穷小量.

如果 z 是个复数, 则从 (1.1.17) 式可知

$$G^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z) = G(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r};z^*) \tag{1.1.20}$$

如果 z 是实数 λ, 但不是 $\hat{L}$ 的本征值, 那么矩阵 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda)$ 对于指标 $\boldsymbol{r}$ 是厄米共轭的. 特别是其对角元 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda)$ 是实数. 如果 λ 是 $\hat{L}$ 的连续谱, 那么两个侧极限之间有如下关系:

$$G^-(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda) = [G^+(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r};\lambda)]^* \tag{1.1.21}$$

把 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$ 时的实部和虚部分别写出来, 为

$$\mathrm{Re}[G^-(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda)] = \mathrm{Re}[G^+(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r};\lambda)] \tag{1.1.22a}$$

$$\mathrm{Im}[G^-(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda)] = -\mathrm{Im}[G^+(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r};\lambda)] \tag{1.1.22b}$$

利用恒等式

$$\lim_{\eta\to0^+}\frac{1}{x\pm\mathrm{i}\eta} = \frac{1}{x\pm\mathrm{i}0^+} = P\frac{1}{x}\mp\mathrm{i}\pi\delta(x) \tag{1.1.23}$$

其中 P 表示主值部分, 将两个侧极限的差值记为 $\widetilde{G}(\lambda)$:

$$\widetilde{G}(\lambda) = G^+(\lambda) - G^-(\lambda)$$

这一差值是

$$\begin{aligned}\widetilde{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\lambda) &= -2\pi\mathrm{i}\sum_n\delta(\lambda-\lambda_n)\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}')\\ &= -2\pi\mathrm{i}\sum_n{}'\delta(\lambda-\lambda_n)\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}') - 2\pi\mathrm{i}\int\delta(\lambda-\lambda_n)\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}n\end{aligned} \tag{1.1.24}$$

侧极限的对角元可从 (1.1.17) 与 (1.1.23) 式得

$$G^\pm(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r};\lambda) = P\sum_n\frac{\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r})}{\lambda-\lambda_n}\mp\mathrm{i}\pi\sum_n\delta(\lambda-\lambda_n)\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}) \tag{1.1.25}$$

对 $\boldsymbol{r}$ 积分, 得

$$\mathrm{tr}G^\pm(\lambda) = P\sum_n\frac{1}{\lambda-\lambda_n}\mp\mathrm{i}\pi\sum_n\delta(\lambda-\lambda_n) \tag{1.1.26}$$

定义态密度 (density of states)$\rho(\lambda)$:

$$\rho(\lambda) = \sum_n\delta(\lambda-\lambda_n) \tag{1.1.27}$$

它表示在 $\lambda\to\lambda+\mathrm{d}\lambda$ 的间隔内本征值的数目. 因为 $\int_{-\infty}^{\infty}\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda = \sum_n 1$ 就是所有本征值的数目. 而量

$$\rho(\boldsymbol{r};\lambda) = \sum_n\delta(\lambda-\lambda_n)\varphi_n(\boldsymbol{r})\varphi_n^*(\boldsymbol{r}) \tag{1.1.28}$$

则是 $\boldsymbol{r}$ 处 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 体积内的态密度, 因为

$$\rho(\lambda) = \int\rho(\boldsymbol{r};\lambda)\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{1.1.29}$$

由 (1.1.25)~(1.1.29) 式得

$$\rho(\boldsymbol{r};\lambda) = \mp\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^\pm(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r};\lambda) \tag{1.1.30}$$

$$\rho(\lambda) = \mp\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}[\mathrm{tr}G^\pm(\lambda)] \tag{1.1.31}$$