参 考 文 献

[1] D. Helmreich *et al.*, "Semiconductor Silicon". (1977), p. 626. Eds H. R. Hatf and E. Sirtel; J. R. Patel, *ibid*, p. 521;
H. M. Liaw, "Semiconduettr Characterizati on Techniques", (1978), p. 190, Eds Peter. A. Barnes and George. A. Rozgoni; L. P. Adda *et al*., *IEEE Trans*, NS15(3) (1968), 347.
[2] H. J. Hrostowski *et al.*, *Phys. Rev.*, 107. (4) (1957), 966; B. Pajot. *J. Phys. Chem. Solids*, 28 (1967), 73; D. R. Bosmworth *et al.*, *Proc. Roy. Soc. London A*, 312(1970). 133.
[3] W. Kaiser *et al.*, *Phys. Rev.*, 101(1956), 1264; Bloem. J. *et al.*, *J. Phys. Chem. Solids*. 12(1959), 22; W. Kaiser, *J. Phys. Chem. Solids*, 23(1962). 255.
[4] ASTM 121-70T, Annual Book of ASTM Standards (1972); ASTM 122-70T, ibid.
[5] W. R. Thurber, NBS Technical Note (1970). 529
[6] M. P. Albert *et al.*. *J. Electrochem. Soc.*, 109(1962), 709.
[7] R. J. Collins *et al.*, *Phys. Rev.*, 93(1954), 643.
[8] E. M. Pyzhkova *et al.*, *Sov. Phys. Semiconductors*. 11. (6) (1977), 628.

INFRARED ABSORPTION OF OXYGEN IN SILICON AND GERMANIUM AT LOW TEMPERATURES

Xu Zhen-jia Chen Yu-zhang Jiang De-sheng Song Chun-ying

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

Li He-cheng Song Xiang-fang

(Institute of Nonferous Metals, Ministry of Metallurgy)

Ye Yi-ying

(Department of Physics, Wuhan University)

ABSTRACT

Infrared Absorption measurements of oxygen in silicon and germanium were made with IR Fourier Transform Spectrometer at temperatures between 6 K and 300 K in the region of 400—4000 cm^{-1}. Resolution was up to 0.5 cm^{-1} when high resolution conditions were adopted.

Detection limit and sources of error on oxygen concentration of silicon and germanium determined by infrared absorption measurement at low temperature were identified. Using a 2 cm thick sample, the lower limit of detectability for oxygen at 20 K is estimated to be 9.6×10^{14} oxygen atom. cm^{-3} and 3.0×10^{14} oxygen atom. cm^{-3} in silicon and germanium respectively. The oxygen concentration of CZ germanium single crystals with different growth conditions was also studied and these results determined by IR measurements havebeen investigated and discussed at temperlithium precipitation technique.

Temperature—dependent fine structure of 1106 cm^{-3} absorption band of silicon with different oxygen concentration have been investigated and discussed at temper atures between 6 K and 300 K.

第 29 卷 第 7 期 物 理 学 报 Vol. 29, No. 7
1980 年 7 月 ACTA PHYSICA SINICA July, 1980

三套闭路格林函数的变换关系

周光召 于 渌 郝柏林
（中国科学院理论物理研究所）

1979 年 8 月 27 日收到

提 要

给出三套闭路格林函数之间的变换关系和若干运算规则，同时得到多点推迟和超前格林函数的一般定义。证明多点格林函数之间的一些代数关系，是闭路上相连格林函数生成泛函 $W[J_+, J_-]|_{J_+=J_-=J} = 0$ 这一性质的后果.

一、引言和记号

自从 Schwinger[1] 首次提出闭路格林函数以来(参看文献 [2] 及其所引文献)，这一处理非平衡统计问题的有效方法未能得到更广泛应用的一种技术性的原因，在于计算形式比较繁琐. 其实只要掌握一些运算规则，闭路格林函数方法与普通量子场论就几乎相同. 除了在文献 [2—4] 中概括过的一些规则外，本文着重讨论多点格林函数之间的变换关系.

闭路格林函数方法中遇到三套函数:

闭路上的 $G_p(1, 2, \cdots, n)$，以下标 p 标志，它出现在闭路积分下面，用以紧致地书写一般关系;

自变量分别在正、负支上取值的矩阵函数 $\hat{G}(1, 2, \cdots, n)$，或以下标希腊字母表示为 $G_{\alpha\beta\cdots}(1, 2, \cdots, n)$，其中 $\alpha, \beta, \cdots = +, -$. 它出现在 $(-\infty, +\infty)$ 的积分下面，用以实现费曼图的计算;

最终用以表示物理关系的推迟、超前和关联函数的矩阵 $\tilde{G}(1, 2, \cdots, n)$，或以下标英文字母表示为 $G_{ij\cdots}(1, 2, \cdots, n)$，其中 $i, j, \cdots = 1, 2$. $\hat{G}$ 和 $\tilde{G}$ 矩阵都有 2^n 个元素.

在讨论它们之间的变换关系之前，先规定本文使用的一些记号. 泡利矩阵记为

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{1.1}$$

将来 σ_3 与 $\hat{G}$, σ_1 与 $\tilde{G}$ 经常一齐出现，而与 σ_2 相联系的实正交矩阵

$$Q = \frac{1 - i\sigma_2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.2}$$

则决定 $\hat{G}$ 与 $\tilde{G}$ 之间的变换.

多点台阶函数的定义为

$$\theta(1, 2, \cdots, n) = \begin{cases} 1 & (\text{当 } t_1 > t_2 > \cdots > t_n), \\ 0 & (\text{其它情形}). \end{cases} \tag{1.3}$$

它是普通两点台阶函数的乘积：

$$\theta(1, 2, \cdots, n) = \theta(1, 2)\theta(2, 3)\cdots\theta(n-1, n), \tag{1.4}$$

用以定义时序算子 T

$$T(\phi(1)\phi(2)\cdots\phi(n)) = \sum_{P_n} \theta(p_1, p_2, \cdots, p_n)\phi(p_1)\phi(p_2)\cdots\phi(p_n), \tag{1.5}$$

此式对 n 个数的一切置换 P_n 求和（本文只以实标量场 ϕ 为例）．θ 函数满足若干一般关系，如归一公式：

$$\sum_{P_n} \theta(p_1, p_2, \cdots, p_n) = 1, \tag{1.6}$$

求和公式 $(n > m)$：

$$\theta(1, 2, \cdots, m) = \sum_{P_n(1, 2, \cdots, m)} \theta(p_1, p_2, \cdots, p_n), \tag{1.7}$$

$P_n(1, 2, \cdots, m)$ 是 1 在 2 前，$\cdots$，$m-1$ 在 m 前的 n 点置换（这时 $t_1, t_2, \cdots, t_m$ 的大小仍是任意的）．$n = m + 1$的情形就是在原有的 m 个时刻外再插一个，如

$$\theta(123) = \theta(4123) + \theta(1423) + \theta(1243) + \theta(1234). \tag{1.8}$$

θ 函数的乘积也可以展开，如

$$\theta(12)\theta(34) = \sum_{P_n(1\text{先于}2, 3\text{先于}4)} \theta(p_1, p_2, \cdots, p_n) \tag{1.9}$$

乘积中遇有相同时刻时，亦可补足为多点关系：

$$\theta(12)\theta(134) = \theta(1234) + \theta(1324) + \theta(1342). \tag{1.10}$$

二、变 换 关 系

n 点闭路格林函数

$$\begin{aligned} G_p(1, 2, \cdots, n) &= (-i)^{n-1}\mathrm{Tr}\{T_p(\phi(1)\phi(2)\cdots\phi(n))\rho\} \\ &\equiv (-i)^{n-1}\langle T_p(1, 2, \cdots, n)\rangle \end{aligned} \tag{2.1}$$

按其自变量分属于正、负支的各种情形写开，就得到 $\hat{G}$ 的各个元素．Keldysh[5] 等人用于从两点函数 $\hat{G}$ 到 $\tilde{G}$ 的变换关系

$$\tilde{G}(12) = Q\hat{G}(12)Q^{-1} \tag{2.2}$$

写成分量形式

$$G_{ij}(12) = Q_{i\alpha}Q_{j\beta}G_{\alpha\beta}(12)$$

就可以直接推广到多点函数

$$G_{i_1i_2\cdots i_n}(1, 2, \cdots, n) = 2^{\frac{n-2}{2}}Q_{i_1\alpha_1}Q_{i_2\alpha_2}\cdots Q_{i_n\alpha_n}G_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n}(1, 2, \cdots, n). \tag{2.3}$$

我们很快会看到，(2.3) 式中自然地包括了一切多点推迟、超前格林函数和关联函数的定义．(2.3) 式中数值因子 $2^{\frac{n-2}{2}}$ 的正确性在下一节中将看得更清楚．这里只需指出，它对

于 $n=1$ 也是对的，即

$$G_i(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}Q_{i\alpha}G_\alpha(x),$$

或

$$\begin{pmatrix}G_1\\G_2\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}G_+-G_-\\G_++G_-\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\G\end{pmatrix}_{G_+=G_-=G}. \tag{2.4}$$

最简单的两点闭路函数是闭路上的 δ-函数．δ_p 的定义为[3]

$$\int_p f(x)\delta_p(x-y)dx=f(y)\quad \forall y\in p, \tag{2.5}$$

相应的另外两个矩阵函数是 $\hat{\delta}$ 和 $\tilde{\delta}=Q\hat{\delta}Q^{-1}$，它们为

$$\hat{\delta}(x-y)=\delta(x-y)\sigma_3,\quad \tilde{\delta}(x-y)=\delta(x-y)\sigma_1. \tag{2.6}$$

这里 $\delta(x-y)\equiv\delta^{(4)}(x-y)$ 是普通的 δ-函数．还可以定义三个闭路台阶函数 θ_p，$\hat{\theta}$ 和 $\tilde{\theta}$，其中

$$\hat{\theta}(12)=\begin{pmatrix}\theta(12), & 0\\ 1, & \theta(21)\end{pmatrix},$$

$$\tilde{\theta}(12)=Q\hat{\theta}Q^{-1}=\begin{pmatrix}0, & -\theta(21)\\ \theta(12), & 1\end{pmatrix}. \tag{2.7}$$

如果不管两点函数的结构，形式上写出 $\hat{G}$ 和 $\tilde{G}$ 两个矩阵的关系，则有

$$\tilde{G}=Q\hat{G}Q^{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}G^{(+)}-G^{(-)}, & G_{\cdot r}+G_{\cdot a}\\ G_{r\cdot}+G_{a\cdot}, & G^{(+)}+G^{(-)}\end{pmatrix}, \tag{2.8}$$

其中引入了记号

$$G_{r\cdot}=G_{++}-G_{+-}=\sum_\alpha \alpha G_{+\alpha},\quad G_{\cdot r}=G_{++}-G_{-+}=\sum_\alpha \alpha G_{\alpha+},$$

$$G_{a\cdot}=G_{-+}-G_{--}=\sum_\alpha \alpha G_{-\alpha},\quad G_{\cdot a}=G_{+-}-G_{--}=\sum_\alpha \alpha G_{\alpha-},$$

$$G^{(+)}=G_{++}+G_{--}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}(1+\alpha\beta)G_{\alpha\beta},$$

$$G^{(-)}=G_{+-}+G_{-+}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}(1-\alpha\beta)G_{\alpha\beta}. \tag{2.9}$$

当两点函数具有时序乘积(2.1)式的结构时，以上各量两两相等，成为推迟函数

$$G_r\equiv G_{r\cdot}=G_{a\cdot}=-i\theta(12)\langle[1,2]\rangle, \tag{2.10a}$$

超前函数

$$G_a\equiv G_{\cdot r}=G_{\cdot a}=-i\theta(21)\langle[2,1]\rangle, \tag{2.10b}$$

和“对称化关联函数”[6]

$$G_c\equiv G^{(+)}=G^{(-)}=-i\langle\{1,2\}\rangle. \tag{2.10c}$$

(2.10)式中[,]和{,}分别表示对易和反对易子．于是

$$\tilde{G}=\begin{pmatrix}0, & G_a\\ G_r, & G_c\end{pmatrix}. \tag{2.11}$$

$\hat{G}$ 通过 $\tilde{G}$ 的三个非零元素表示为[3]

$$\hat{G}=\frac{1}{2}G_c\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}+\frac{1}{2}G_r\begin{pmatrix}1&-1\\1&-1\end{pmatrix}+\frac{1}{2}G_a\begin{pmatrix}1&1\\-1&-1\end{pmatrix},\tag{2.12}$$

这里数值矩阵都是奇异的。

以上变换容易推广到多点函数。我们跳过三点函数，直接写出四点函数的变换。先不管四点函数的结构，按照

$$G_{ijkl}=2Q_{i\alpha}Q_{i\beta}Q_{k\gamma}Q_{l\delta}G_{\alpha\beta\gamma\delta}\tag{2.13}$$

得到 $\tilde{G}$ 矩阵的 16 个元素为

$$\begin{aligned}
&G_{1111}=\frac{1}{2}(G^{(+)}-G^{(-)}),\quad G_{2222}=\frac{1}{2}(G^{(+)}+G^{(-)}),\\
&G_{2111}=\frac{1}{2}(G_{r}\ldots+G_{a}\ldots)\ \text{等 4 个},\\
&G_{2211}=\frac{1}{2}(G_{rr}\ldots+G_{aa}\ldots)\ \text{等 6 个},\\
&G_{2221}=\frac{1}{2}(G_{rrr}.+G_{aaa}.)\ \text{等 4 个},
\end{aligned}\tag{2.14}$$

其中引入了记号

$$\begin{aligned}
&G^{(\pm)}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}(1\pm\alpha\beta\gamma\delta)G_{\alpha\beta\gamma\delta},\\
&G_{r}\ldots=\sum_{\alpha\beta\gamma}\alpha\beta\gamma G_{+\alpha\beta\gamma}\ \text{等 4 个},\\
&G_{a}\ldots=\sum_{\alpha\beta\gamma}\alpha\beta\gamma G_{-\alpha\beta\gamma}\ \text{等 4 个},\\
&G_{rr}\ldots=\sum_{\alpha\beta}\alpha\beta(G_{++\alpha\beta}+G_{--\alpha\beta})\ \text{等 6 个},\\
&G_{aa}\ldots=\sum_{\alpha\beta}\alpha\beta(G_{+-\alpha\beta}+G_{-+\alpha\beta})\ \text{等 6 个}.
\end{aligned}\tag{2.15}$$

（以上两行右端写明了的下标分别与两点函数 $G^{(+)}$，$G^{(-)}$ 一致.）

$$\begin{aligned}
&G_{rrr}.=\sum_{\alpha}\alpha(G_{+++\alpha}+G_{+--\alpha}+G_{-+-\alpha}+G_{--+\alpha})\ \text{等 4 个},\\
&G_{aaa}.=\sum_{\alpha}\alpha(G_{---\alpha}+G_{-++\alpha}+G_{+-+\alpha}+G_{++-\alpha})\ \text{等 4 个}.
\end{aligned}$$

（以上两行右端明显写出的下标分别与三点函数 $G^{(+)}$，$G^{(-)}$ 一致.）

如果 $G_p(1234)$ 是时序乘积的平均值，如 (2.1) 式，则利用 (1.3)—(1.10) 诸式和定义 (2.15) 式可得

$$\begin{aligned}
&G_{1111}=0,\quad G_{2222}=G_c=G^{(+)}=G^{(-)},\\
&G_{2111}=G_{r}\ldots=G_{a}\ldots\ \text{等 4 式},\\
&G_{2211}=G_{rr}\ldots=G_{aa}\ldots\ \text{等 6 式},\\
&G_{2221}=G_{rrr}.=G_{aaa}.\ \text{等 4 式},
\end{aligned}\tag{2.16}$$

具体写出来为

$$G_{2111} = i \sum_{P_3} \theta(1p_2p_3p_4)\langle[[[1, p_2], p_3], p_4]\rangle \quad 等,$$

$$\begin{aligned} G_{2211} = i \sum_{\substack{\binom{1\ 2}{p_1\ p_2} \\ \binom{3\ 4}{p_3\ p_4}}} &\{\theta(p_1p_2p_3p_4)\langle[[\{p_1, p_2\}, p_3], p_4]\rangle \\ &+ \theta(p_1p_3p_2p_4)\langle[\{[p_1, p_3], p_2\}, p_4]\rangle \\ &+ \theta(p_1p_3p_4p_2)\langle\{[[p_1, p_3], p_4], p_2\}\rangle\} \quad 等, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_{2221} = i \sum_{P_3} &\{\theta(p_1p_2p_34)\langle[\{\{p_1, p_2\}, p_3\}, 4]\rangle \\ &+ \theta(p_1p_24p_3)\langle\{[\{p_1, p_2\}, 4], p_3\}\rangle \\ &+ \theta(p_14p_2p_3)\langle\{\{[p_1, 4], p_2\}, p_3\}\rangle\} \quad 等, \end{aligned}$$

$$G_c = i \sum_{P_4} \theta(p_1p_2p_3p_4)\langle\{\{\{p_1, p_2\}, p_3\}, p_4\}\rangle. \tag{2.17}$$

这些式子中包含了三重嵌套的对易子[,]和反对易子{,}的一切组合,对应四个时刻的一切可能的超前和推迟排列("一点在前","两点之一在前"、"三点之一在前"等等),因此各种四点推迟和超前函数都在其中了.

以上诸式都是为不相连格林函数推导的. 对于相连格林函数存在着完全类似的关系. 只要注意从定义

$$G_p(1, 2, \cdots, n) = i \left.\frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(1)\delta J(2)\cdots\delta J(n)}\right|_{J=0},$$

$$G_p^c(1, 2, \cdots, n) = \left.\frac{\delta^n W[J]}{\delta J(1)\delta J(2)\cdots\delta J(n)}\right|_{J=0},$$

$$W[J] = i \ln Z[J] \tag{2.18}$$

(上角标 c 表示"连接", $Z[J]$ 和 $W[J]$ 是相应的生成泛函[3,7])得到如下关系:

$$\begin{aligned} G_p^c(1) &= G_p(1), \\ G_p^c(12) &= G_p(12) + iG_p(1)G_p(2), \\ G_p^c(123) &= G_p(123) + i[G_p(1)G_p(23) + G_p(2)G_p(13) \\ &\quad + G_p(3)G_p(12)] - 2G_p(1)G_p(2)G_p(3), \\ &\cdots\cdots \end{aligned} \tag{2.19}$$

就可以算出: 两点函数中只有对称化关联函数变为

$$G_c^c(12) = -i(\langle\{1, 2\}\rangle - \{\langle 1\rangle, \langle 2\rangle\}); \tag{2.20}$$

三点函数中

$$G_{211}^c(123) = G_{211}(123) = -\sum_{P_2} \theta(1p_2p_3)\langle[[1, p_2], p_3]\rangle \tag{2.21}$$

没有变化,而

$$\begin{aligned} G_{122}^c(123) = -\sum_{P_2} &\{\theta(p_2p_31)(\langle[\{p_2, p_3\}, 1]\rangle - \langle[\langle p_2\rangle p_3, 1]\rangle \\ &- \langle[p_2\langle p_3\rangle, 1]\rangle) + \theta(p_21p_3)(\langle\{[p_2, 1], p_3\}\rangle - \langle[p_2, 1]\rangle\langle p_3\rangle)\}, \end{aligned}$$

$$G_c^c(123) = -\sum_{P_3} \theta(p_1p_2p_3)(\langle\{\{p_1, p_2\}, p_3\}\rangle - \langle\{p_1, p_2\}\rangle\langle p_3\rangle$$
$$+ 2\{\{\langle p_1\rangle, \langle p_2\rangle\}, \langle p_3\rangle\}), \tag{2.22}$$

等等；四点函数可紧凑地写为

$$\begin{aligned}
G_{2111}^c &= G_{2111}, \\
G_{2211}^c &= G_{2211} + 2i[G(1)G_{211}(234) + G(2)G_{211}(134)] \\
&\quad + 2i[G_r(13)G_r(24) + G_r(14)G_r(23)], \\
G_{2221}^c &= G_{2221} + 2i[G(1)G_{221}(234) + G(2)G_{221}(134) + G(3)G_{221}(124)] \\
&\quad + 2i[G_c(12)G_r(34) + G_c(13)G_r(24) + G_c(23)G_r(14)] \\
&\quad - 8[G(1)G(2)G_r(34) + G(1)G(3)G_r(24) \\
&\quad + G(2)G(3)G_r(14)],
\end{aligned} \tag{2.23}$$

等等．注意，完全由对易子嵌套而成的推迟函数 $G_{211\cdots1}^c = G_{211\cdots1}$，相当于 LSZ[8] 构造公理化场论时引入的 r-函数，不受连接与否的影响，而所有其它推迟、超前和关联函数都随是否用相连格林函数定义而有所不同．

三、串联和并联规则

作为三套函数互相变换的实例，我们看一批闭路上多点函数的运算规则(文献 [4] 中已经给过一些这类规则)．掌握这些规则，可以迅速地从由 G_p 表示的关系，如 Dyson 方程，变到由 $\hat{G}$ 或 $\tilde{G}$ 表示的关系．

1. 最简单的串联关系是两个单点函数乘积的积分

$$\int_p J_p(x)\phi_p(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{J}\sigma_3\hat{\phi}dx = 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{J}\sigma_1\tilde{\phi}dx, \tag{3.1}$$

其中 $\hat{J} = (J_+, J_-)$，$\tilde{\phi} = \begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}$ 等等．以后省去积分符号，对重复出现的自变量自动求积分．除 G_p 的积分限于坐标空间外，对 $\hat{G}$ 和 $\tilde{G}$ 的积分可不区别坐标和动量表示．有时连自变量也省去不写．因此，如有关系

$$R_p(1) = G_p(12)J_p(2) \quad 或 \quad R_p = G_pJ_p,$$

则分出正、负支即插入 σ_3 矩阵，得

$$\hat{R}(1) = \hat{G}(12)\sigma_3\hat{J}(2) \quad 或 \quad \hat{R} = \hat{G}\sigma_3\hat{J},$$

两面乘以 Q 和 Q^{-1} 得

$$\tilde{R}(1) = \tilde{G}(12)\sigma_1\tilde{J}(2) \quad 或 \quad \tilde{R} = \tilde{G}\sigma_1\tilde{J}. \tag{3.2}$$

如果 J 是外场，最终应令其在正、负支上相等，(3.2) 式就是

$$\begin{pmatrix}R_1\\ R_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ G_rJ\end{pmatrix},$$

在对外场的响应中自动出现推迟函数．

2. 两点函数的串联关系

$$D_p(12) = A_p(13)B_p(32)$$

立即变成

$$\hat{D} = \hat{A}\sigma_3\hat{B} \quad 和 \quad \tilde{D} = \tilde{A}\sigma_1\tilde{B},$$

后者写成分量为

$$\begin{pmatrix} 0 & D_a \\ D_r & D_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & A_a B_a \\ A_r B_r & A_r B_c + A_c B_a \end{pmatrix}. \tag{3.3}$$

这个规则直接推广到多个两点函数的乘积，对

$$Z_p = A_p^{(1)} A_p^{(2)} \cdots A_p^{(n)}$$

有

$$\hat{Z} = \hat{A}^{(1)}\sigma_3\hat{A}^{(2)}\sigma_3 \cdots \sigma_3\hat{A}^{(n)}$$

和

$$\tilde{Z} = \tilde{A}^{(1)}\sigma_1\tilde{A}^{(2)}\sigma_1 \cdots \sigma_1\tilde{A}^{(n)},$$

后者写成分量为

$$Z_r = A_r^{(1)} A_r^{(2)} \cdots A_r^{(n)}, \quad Z_a = A_a^{(1)} A_a^{(2)} \cdots A_a^{(n)}, \tag{3.4}$$

特别是

$$Z_c = \sum_{k=1}^{n} A_r^{(1)} \cdots A_r^{(k-1)} A_c^{(k)} A_a^{(k+1)} \cdots A_a^{(k)}. \tag{3.5}$$

类似地，利用逆变换 $\hat{Z} = Q^{-1}\tilde{Z}Q$ 和 (2.12) 式，可得

$$Z_\mu = \sum_{k=1}^{n} A_r^{(1)} \cdots A_r^{(k-1)} A_\mu^{(k)} A_a^{(k+1)} \cdots A_a^{(k)}, \tag{3.6}$$

其中 $\mu = +-$ 或 $-+$.

积分下有多点函数时，插入 σ_i 矩阵要注意变量顺序. 例如三端顶角函数

$$\Gamma_p(123) = i\Gamma_p(14)\Gamma_p(25)\Gamma_p(36)G_p(456) \tag{3.7}$$

应变为

$$\hat{\Gamma}(123) = i(\hat{\Gamma}\sigma_3)(14)(\hat{\Gamma}\sigma_3)(25)(\hat{\Gamma}\sigma_3)(36)\hat{G}(456),$$

再变成

$$\tilde{\Gamma}(123) = i(\tilde{\Gamma}\sigma_1)(14)(\tilde{\Gamma}\sigma_1)(25)(\tilde{\Gamma}\sigma_1)(36)\tilde{G}(456),$$

按分量写开得

$$\Gamma_{111} = 0, \quad \Gamma_{211} = i\Gamma_r\Gamma_a\Gamma_a G_{211},$$
$$\Gamma_{221} = i(\Gamma_c\Gamma_r\Gamma_a G_{121} + \Gamma_r\Gamma_c\Gamma_a G_{211} + \Gamma_r\Gamma_r\Gamma_a G_{221})$$

等等.

只要是理论中自然出现的多点函数的关系，就不会在变换后出现多余的数值因子. 例如四端顶角函数 $\Gamma_p^{(4)}$ 与截腿格林函数 $W_p^{(n)}$ 的关系[7]

$$\Gamma_p^{(4)} = -W_p^{(4)} + 3W_p^{(3)}G_p^{(2)}W_p^{(3)} \tag{3.8}$$

变成

$$\hat{\Gamma}^{(4)} = -\hat{W}^{(4)} + 3\hat{W}^{(3)}\sigma_3\hat{G}^{(2)}\sigma_3\hat{W}^{(3)}$$

和

$$\tilde{\Gamma}^{(4)} = -\tilde{W}^{(4)} + 3\tilde{W}^{(3)}\sigma_1\tilde{G}^{(2)}\sigma_1\tilde{W}^{(3)}.$$

只有一些人为地“收缩”出来的关系如

$$A_p(12) = B_p(134)C_p(342)$$

导致

$$\widetilde{A}(12) = \frac{1}{2}\widetilde{B}(134)(\sigma_1)_{33'}(\sigma_1)_{44'}\widetilde{C}(3'4'2),$$

才多出数值因子 1/2. 这说明 $\hat{G}$ 和 $\widetilde{G}$ 的一般变换公式 (2.3) 中，因子 $2^{\frac{n-2}{2}}$ 的选择是对的.

3. 含 δ-函数的串联关系

$$G_p(13)\Gamma_p(32) = \Gamma_p(13)G_p(32) = \delta_p(12),$$

使 G_p 和 Γ_p 成为闭路上的逆矩阵. 变换后有

$$\begin{aligned}\hat{G}\sigma_3\hat{\Gamma} &= \hat{\Gamma}\sigma_3\hat{G} = \delta,\\ \widetilde{G}\sigma_1\tilde{\Gamma} &= \tilde{\Gamma}\sigma_1\widetilde{G} = \delta.\end{aligned} \tag{3.9}$$

可见 $\sigma_3\hat{G}\sigma_3$ 和 $\hat{\Gamma}$，$\widetilde{G}$ 和 $\sigma_1\tilde{\Gamma}\sigma_1$ 等等，才是普通意义下的逆矩阵. 只要 G_p 是"闭路矩阵"，即

$$G_{++} + G_{--} = G_{+-} + G_{-+} \text{ 或 } G_{11} = 0 \tag{3.10a}$$

(由第二节知道这是 G_p 本身为时序乘积平均值的后果)，这一性质就由 (3.9) 式传给 Γ_p:

$$\Gamma_{++} + \Gamma_{--} = \Gamma_{+-} + \Gamma_{-+} \text{ 或 } \Gamma_{11} = 0. \tag{3.10b}$$

因此 $\tilde{\Gamma}$ 可以写成类似 (2.11) 式的样子

$$\tilde{\Gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma_a \\ \Gamma_r & \Gamma_c \end{pmatrix}, \tag{3.11}$$

这时并不要求 Γ_p 可以写成时序乘积的平均值.

由 $G_p(12) = G_p(21)$、密度矩阵 ρ 和实标量场 ϕ 的厄米性，以及阵迹符号 Tr 下的循环不变性，可以证明 G_p 满足

$$\hat{G} = \hat{G}^T = -\sigma_1\hat{G}^*\sigma_1 = -\sigma_1\hat{G}^+\sigma_1, \tag{3.12a}$$

作傅氏变换后有

$$\begin{aligned}\hat{G}(k) &= \hat{G}^T(-k) = -\sigma_1\hat{G}^*(-k)\sigma_1 = -\sigma_1\hat{G}^+(k)\sigma_1,\\ \widetilde{G}(k) &= \widetilde{G}^T(-k) = -\sigma_3\widetilde{G}^*(-k)\sigma_3 = -\sigma_3\widetilde{G}^+(k)\sigma_3.\end{aligned} \tag{3.12b}$$

这里上标 T 是转置、$*$ 是复共轭、$+$ 是厄米共轭. 这些性质全部通过 (3.9) 式传给逆矩阵 $\hat{\Gamma}$ 和 $\tilde{\Gamma}$，而不要求知道 Γ_p 的具体结构. 利用 (3.7)，(3.8) 诸式可以证明，多点格林函数的闭路性质，同样传给相应的多点顶角函数.

利用闭路逆矩阵还可以写出高斯型闭路连续积分公式(省去"常数"因子)

$$\begin{aligned}&\int [d\phi_p]\exp\left(-\frac{1}{2}\phi_p\Gamma_p\phi_p + J_p\phi_p\right)\\ &= \int [d\phi_+ d\phi_-]\exp\left(-\frac{1}{2}\hat{\phi}\sigma_3\hat{\Gamma}\sigma_3\hat{\phi} + \hat{J}\sigma_3\hat{\phi}\right)\\ &= \cdots = \exp\left(-\frac{1}{2}J_pG_pJ_p\right).\end{aligned} \tag{3.13}$$

4. 并联关系如 $A_p(12)B_p(12)C_p(12)$ 应作为一个记号参加变换. 变换结果是否具有闭路矩阵形式，通常可由费曼图看出来. 例如

$$S_p(12) = G_p^3(12) \tag{3.14}$$

可成为两点函数的串联部分(自能部份),应当具有闭路性质. 事实上,由 (3.10a) 式和 $G_r(12)G_a(12)=0$ 可证

$$G^3_{++}(12)+G^3_{--}(12)=G^3_{+-}(12)+G^3_{-+}(12),$$

进而得

$$\tilde{S}(12)=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}0 & G_a[G_a^2+3G_c^2]\\ G_r[G_r^2+3G_c^2] & G_c[G_c^2+3(G_a+G_r)^2]\end{pmatrix}. \tag{3.15}$$

并联变换应在坐标表示中讨论.

四、多点格林函数闭路性质的一般证明

第二节中讨论的相连和不相连格林函数,具有一些普遍性质,如 $G^{(+)}=G^{(-)}$,即

$$G_+=G_- \quad (\text{单点函数}),$$
$$G_{++}+G_{--}=G_{+-}+G_{-+} \quad (\text{两点函数}),$$
$$G_{+++}+G_{+--}+G_{-+-}+G_{--+}=G_{---}+G_{-++}+G_{+-+}+G_{++-} \quad (\text{三点函数}),$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{4.1}$$

等等.这些关系变换到 $\tilde{G}$ 矩阵就成为

$$G_1=0,\ G_{11}=0,\ G_{111}=0,\ \cdots \tag{4.2}$$

凡是满足条件 (4.1) 式或 (4.2) 式的多点函数,前面已经称为闭路矩阵,这是文献 [2] 中对两点函数所给定义的推广. (4.1) 式的另一后果,就是定义 $\tilde{G}$ 矩阵各元素时引入的记号如 (2.9),(2.15) 诸式,满足如下的等式:

$$G_{r\cdot}=G_{a\cdot},\ G_{r\cdot\cdot}=G_{a\cdot\cdot},\ G_{r\cdot\cdot\cdot}=G_{a\cdot\cdot\cdot}, \tag{4.3}$$
$$G_{rr\cdot}=G_{aa\cdot},\ G_{rr\cdot\cdot}=G_{aa\cdot\cdot}, \tag{4.4}$$
$$G_{rrr\cdot}=G_{aaa\cdot}, \tag{4.5}$$

等等.第二节中通过直接计算得到了这些关系.现在为 n 点格林函数给出一般证明.

普通格林函数生成泛函的归一或归零条件[7]

$$Z[J]|_{J=0}=1,\ W[J]|_{J=0}=0.$$

在闭路情形下推广为

$$Z[J_+,J_-]|_{J_+=J_-=J}=1, \tag{4.6}$$
$$W[J_+,J_-]|_{J_+=J_-=J}=0, \tag{4.7}$$

这可由它们的定义[3]看出来. 这里并不要求 $J=0$,于是增加了很大的活动余地. 事实上,$J_2=\frac{1}{2}(J_++J_-)$ 是物理外场,$J_1=\frac{1}{2}(J_+-J_-)$ 才相当于构造生成泛函时引入的形式外源,参看 (2.4) 和 (3.2) 式.

取 $W[J_+,J_-]$,令 $J_\pm=J_0+\delta J_\pm$,在 J_0 附近展开.利用第三节中的简化记法,得

$$W[J_+,J_-]=\left(\frac{\delta W}{\delta J_+}\delta J_+-\frac{\delta W}{\delta J_-}\delta J_-\right)+\frac{1}{2!}\left(\delta J_+\frac{\delta^2 W}{\delta J_+\delta J_+}\delta J_+\right.$$
$$\left.+\delta J_-\frac{\delta^2 W}{\delta J_-\delta J_-}\delta J_--\delta J_+\frac{\delta^2 W}{\delta J_+\delta J_-}\delta J_--\delta J_-\frac{\delta^2 W}{\delta J_-\delta J_+}\delta J_+\right)+\cdots,$$

式中各变分导数均取在 $J_+ = J_- = J_0$ 处．进一步取 $\delta J_+ = \delta J_- = \delta J$，使得 $J_+ = J_-$，于是由 δJ 之任意性得到一批关系：

$$\frac{\delta W}{\delta J(x_+)} = \frac{\delta W}{\delta J(x_-)}\bigg|_{J_+=J_-=J},$$

$$\frac{\delta^2 W}{\delta J(x_+)\delta J(y_+)} + \frac{\delta^2 W}{\delta J(x_-)\delta J(y_-)} = \frac{\delta^2 W}{\delta J(x_+)\delta J(y_-)} + \frac{\delta^2 W}{\delta J(x_-)\delta J(y_+)}\bigg|_{J_+=J_-=J},$$

$$\frac{\delta^3 W}{\delta J(x_+)\delta J(y_+)\delta J(z_+)} + \frac{\delta^3 W}{\delta J(x_+)\delta J(y_-)\delta J(z_-)} + \frac{\delta^3 W}{\delta J(x_-)\delta J(y_+)\delta J(z_-)}$$
$$+ \frac{\delta^3 W}{\delta J(x_-)\delta J(y_-)\delta J(z_+)} = \frac{\delta^3 W}{\delta J(x_-)\delta J(y_-)\delta J(z_-)} + \frac{\delta^3 W}{\delta J(x_-)\delta J(y_+)\delta J(z_+)}$$
$$+ \frac{\delta^3 W}{\delta J(x_+)\delta J(y_-)\delta J(z_+)} + \frac{\delta^3 W}{\delta J(x_+)\delta J(y_+)\delta J(z_-)}\bigg|_{J_+=J_-=J},$$

$$\cdots\cdots \tag{4.8}$$

等等．在 (4.8) 式中取 $J = 0$，即得 (4.1) 式．如果不令 $J = 0$，而以 $W[J]$ 作为解析泛函的展开式

$$W[J] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\int_p \cdots \int_p G_p^c(1, 2, \cdots, n) J(1)J(2)\cdots J(n) d1d2\cdots dn \tag{4.9}$$

代入 (4.8) 式的第一式，注意

$$\frac{\delta J(x_i)}{\delta J(y_\pm)} = \delta_p(x_i - y_\pm)$$

和 G_p^c 的对称性，得到（省去积分符号）

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!}[G_p^c(+, 1, 2, \cdots n-1) - G_p^c(-, 1, 2, \cdots n-1)]$$
$$\times J(1)J(2)\cdots J(n-1)|_{J_+=J_-} = 0,$$

变换成 $\hat{G}$，$\hat{J}$ 形式时，注意 $(\sigma_3 J)_\alpha$ 可以写成 αJ_α（这里 $\alpha = \pm$，但不对重复出现的 α 自动求和），得

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\alpha_i} \alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n [G^c_{+\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n} - G^c_{-\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n}] J_{\alpha_1}(1)J_{\alpha_2}(2)\cdots J_{\alpha_n}(n)|_{J_+=J_-} = 0,$$

在正、负支上取相同的外源时，$J_{\alpha_i}(i)$ 实际上与 α_i 无关．于是由 J 的任意性，对任何 $n \geqslant 1$ 得到

$$\sum_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n} \alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n G^c_{+\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n} = \sum_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n} \alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n G^c_{-\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n},$$

这就是 (4.3) 式的一般形式．

如果以 (4.9) 式代入 (4.8) 式的第二、三…诸式，经过类似的推导，即得 (4.4)，(4.5) 各式．同样地，从 (4.6) 式出发，可对不相连格林函数得到完全相同的一批关系．

五、讨　论

本文主要分析了与三套闭路格林函数有关的若干代数关系．在处理具体物理问题时

可以利用这些关系来简化闭路格林函数的推导过程．我们的主要收获，是看清楚了如何在多时刻情形下统一地定义一切推迟、超前和关联函数．这些函数本身是定义在普通的$(-\infty、+\infty)$时间轴上的，然而只有借助闭路格林函数的变换，才自然地得到了它们．

三点函数出现在表面物理的某些问题中．四点函数可用以推导 Bethe-Salpeter 方程．在动态临界现象理论中，无论从广义朗之万方程出发，还是使用拉格朗日形式的统计场论，目前都是在 $\tilde{G}$ 形式下建立重正化微扰论．因此，只能用迭代产生高阶项，得到看起来与量子场论颇为不同的费曼图．事实上应当回到 G_p 或 $\hat{G}$ 形式去，理论的结构才更清楚．我们将在以后的几篇文章中，应用闭路格林函数研究临界动力学．

参 考 文 献

[1] J. Schwinger, *J. Math. Phys.*, **2** (1961), 407.
[2] 周光召、苏肇冰，闭路格林函数和它在非平衡统计物理中的应用，«统计物理进展»第五章，科学出版社(待出版).
[3] 周光召、苏肇冰，高能物理与核物理，**3** (1979), 314.
[4] D. Langreth, In «Linear and Nonlinear Transport in Solids», ed. by J. Devreese and V. Van. Doren, Plenum, N. Y. (1976).
[5] Л. Келдыш, *ЖЭТФ*, **47** (1964), 1515.
[6] R. Kubo, *Reps. Progr. Phys.*, **29** (1966), 255.
[7] 郝柏林，统计微扰论的生成泛函，«统计物理进展»第一章，科学出版社(待出版).
[8] H. Lehmann, K. Symanzik, W. Zimmermann, *Nuovo Cimento*, **6** (1957), 319.

TRANSFORMATION PROPERTIES OF THREE SETS OF CLOSED TIME PATH GREEN'S FUNCTIONS

ZHOU GUANG-ZHAO YU LU HAO BAI-LIN

(Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

In this article, we derived the transformations among three sets of closed time path Green's functions and some calculation rules, from which a general definition of arbitrary multipoint retarded and advanced Green's functions follows naturally. Some algebraic identities among multipoint functions have shown to be the consequences of the property $W[J_+, J_-]|_{J_+=J_-=J} = 0$ for the generating functional on the closed time path.