

格林函数计算中的几个问题

Green Function:

$$G(\kappa, t - t') \equiv -i \langle T[C_{\kappa}(t)C_{\kappa}^{\dagger}(t')] \rangle \quad (1\text{fermion})$$

$$D(q, t - t') \equiv -i \langle T[A_q(t)A_{-q}^{\dagger}(t')] \rangle \quad (1\text{boson})$$

1) 单个空带:

$$\hat{C}_{\kappa}|0\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} G(\kappa, t - t') &= -i\theta(t - t') \langle C_{\kappa}(t)C_{\kappa}^{\dagger}(t') \rangle \\ &= -i\theta(t - t')e^{-i\varepsilon_{\kappa}(t-t')} \end{aligned} \quad (2)$$

Fourier transform:

$$\begin{aligned} G(\kappa, E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} G(\kappa, t) \\ &= \frac{1}{E - \varepsilon_{\kappa} + i\delta} \end{aligned} \quad (3)$$

2) A degenerate electron gas:

$$\langle |\hat{C}_{\kappa}^{\dagger}\hat{C}_{\kappa}| \rangle = \theta(\kappa_F - \kappa) \quad (4a)$$

$$\langle |\hat{C}_{\kappa}\hat{C}_{\kappa}^{\dagger}| \rangle = \theta(\kappa - \kappa_F) \quad (4b)$$

$$\begin{aligned} G(\kappa, t - t') &= -i \langle T[\hat{C}_{\kappa}(t)\hat{C}_{\kappa}^{\dagger}(t')] \rangle \\ &= -i\theta(t - t')\theta(\varepsilon_{\kappa})e^{-i\varepsilon_{\kappa}(t-t')} + i\theta(t' - t)\theta(-\varepsilon_{\kappa})e^{-i\varepsilon_{\kappa}(t-t')} \\ &= -i[\theta(t - t')\theta(\varepsilon_{\kappa}) - \theta(t' - t)\theta(-\varepsilon_{\kappa})]e^{-i\varepsilon_{\kappa}(t-t')} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} G(\kappa, \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G(\kappa, t) \\ &= \frac{\theta(\varepsilon_{\kappa})}{\omega - \varepsilon_{\kappa} + i\delta} + \frac{\theta(-\varepsilon_{\kappa})}{\omega - \varepsilon_{\kappa} - i\delta} \\ &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\kappa} + i\delta_{\kappa}} \end{aligned} \quad (6)$$

其中: $\delta_{\kappa} = \delta \text{Sign}(\varepsilon_{\kappa})$ 。 3) Phonon: Zero-Temperature

$$\langle |\hat{a}_q^{\dagger}\hat{a}_q| \rangle = 0 \quad (7a)$$

$$\langle |\hat{a}_q\hat{a}_q^{\dagger}| \rangle = 1 \quad (7b)$$

$$\begin{aligned}
D(q, t-t') &= -i \langle T[\hat{A}_q(t)\hat{A}_{-q}(t')] \rangle \\
&= -i \langle T[(\hat{a}_q e^{-i\omega_q t} + \hat{a}_{-q}^\dagger e^{i\omega_q t})(\hat{a}_{-q} e^{-i\omega_q t'} + \hat{a}_q^\dagger e^{i\omega_q t'})] \rangle \\
&= -i[\theta(t-t')e^{-i\omega_q(t-t')} + \theta(t'-t)e^{i\omega_q(t-t')}]
\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
D(q, \omega) &= \frac{1}{\omega - \omega_q + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_q - i\delta} \\
&= \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2 + i\delta}
\end{aligned} \tag{9}$$

所有的物理过程都要满足因果律，因此，所要计算的各种关联函数也要满足因果关系。为了计算的方便，特别是在相空间中的计算，都省略了反映因果律（或时序乘积）的收敛因子 $\delta \rightarrow 0^+$ ，而在最后的计算中要恢复收敛因子，才能得到正确的结果。

正确的恢复收敛因子 $\delta \rightarrow 0^+$ ，应从两方面考虑：

a 物理过程。

b 数学原理：约当引理

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx F(x) e^{imx}, (|x| \rightarrow \infty, F(x) \rightarrow 0)$$

a) $m > 0$ ，延拓到上半复平面；

b) $m < 0$ ，延拓到下半复平面。

例如：

$$G(\kappa, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_\kappa}$$

的Fourier的逆变换：

$$\begin{aligned}
G(\kappa, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G(\kappa, \omega) e^{-i\omega t} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \varepsilon_\kappa}
\end{aligned} \tag{10}$$

极点在实轴上，要做解析延拓。 $\omega = \varepsilon_\kappa \pm i\delta$ 。

a 物理过程：

$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_\kappa > 0 \text{ 对应于产生-湮灭粒子过程，因果关系，推迟部分；} \\ \varepsilon_\kappa < 0 \text{ 对应于湮灭-产生粒子过程，反因果关系，超前部分。} \end{array} \right.$

$$\begin{cases} \varepsilon_\kappa > 0, \omega = \varepsilon_\kappa - i\delta \\ \varepsilon_\kappa < 0, \omega = \varepsilon_\kappa + i\delta \end{cases} \tag{11}$$

$$G(\kappa, t) = \frac{\theta(\varepsilon_\kappa)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \varepsilon_\kappa + i\delta} + \frac{\theta(-\varepsilon_\kappa)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \varepsilon_\kappa - i\delta} \tag{12}$$

b 应用约当引理：

$t > 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) e^{i\omega t}$ 取上半复平面的回路

$t < 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) e^{i\omega t}$ 取下半复平面的回路

$$\begin{aligned} G(\kappa, t) &= \frac{\theta(\varepsilon_{\kappa})}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \varepsilon_{\kappa} + i\delta} [\theta(t) + \theta(-t)] + \frac{\theta(-\varepsilon_{\kappa})}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \varepsilon_{\kappa} - i\delta} [\theta(t) + \theta(-t)] \\ &= -i\theta(t)\theta(\varepsilon_{\kappa})e^{-i\varepsilon_{\kappa}t} + i\theta(-t)\theta(-\varepsilon_{\kappa})e^{-i\varepsilon_{\kappa}t} \\ &= -i[\theta(t)\theta(\varepsilon_{\kappa}) - \theta(-t)\theta(-\varepsilon_{\kappa})]e^{-i\varepsilon_{\kappa}t} \end{aligned} \quad (13)$$

例如:

$$G(q, \omega) = \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2} = \frac{1}{\omega - \omega_q} - \frac{1}{\omega + \omega_q}, (\omega_q > 0)$$

作Fourier逆变换

$$\begin{aligned} G(q, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G(q, \omega) e^{-i\omega t} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\frac{1}{\omega - \omega_q} - \frac{1}{\omega + \omega_q} \right] e^{-i\omega t} \theta(\omega_q) \\ &= \frac{\theta(\omega_q)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\frac{1}{\omega - \omega_q + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_q - i\delta} \right] e^{-i\omega t} (\theta(t) + \theta(-t)) \\ &= -i\theta(\omega_q) [\theta(t)e^{-i\omega_q t} + \theta(-t)e^{i\omega_q t}] \end{aligned} \quad (14)$$

例如对一个费米系统

$$G(\kappa, q, \omega) = \frac{1}{\omega + \varepsilon_{\kappa} - \varepsilon_{\kappa+q}}$$

的Fourier逆变换

$\omega = \varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa} > 0$, 对应于产生粒子空穴对过程, 因果关系, 推迟部分;

$\omega = \varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa} < 0$, 对应于湮灭粒子空穴对过程, 反因果关系, 超前部分。

$$\left. \begin{array}{l} \kappa + q \geq \kappa_F \\ \kappa < \kappa_F \end{array} \right\} \begin{array}{l} \kappa + q < \kappa_F \\ \kappa > \kappa_F \end{array}$$

$$\begin{aligned} G(\kappa, q, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega G(\kappa, q, \omega) \\ &= \frac{\theta(\varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa})}{2\pi} \int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + \varepsilon_{\kappa} - \varepsilon_{\kappa+q} + i\delta} (\theta(t) + \theta(-t)) \\ &\quad + \frac{\theta(\varepsilon_{\kappa} - \varepsilon_{\kappa+q})}{2\pi} \int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + \varepsilon_{\kappa} - \varepsilon_{\kappa+q} - i\delta} (\theta(t) + \theta(-t)) \\ &= -i\theta(\varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa})\theta(t)e^{-i(\varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa})t} + i\theta(\varepsilon_{\kappa} - \varepsilon_{\kappa+q})\theta(-t)e^{-i(\varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa})t} \\ &= -i[\theta(t)\theta(\varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa}) - \theta(-t)\theta(\varepsilon_{\kappa} - \varepsilon_{\kappa+q})]e^{-i(\varepsilon_{\kappa+q} - \varepsilon_{\kappa})t} \end{aligned} \quad (15)$$

体系不是基态而 $G = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\kappa, q}}$ $\varepsilon_{\kappa, q}$ 是电子的

的能量如 $\varepsilon_{\kappa, q} > 0$ 则意味着在 Fermi 面以上, 激发态。

基态为 $T=0$, 激发态为 $T>0$ 时推迟, $\varepsilon_{\kappa, q} < 0$, 只将体系在基态前的状态, 超前。