

www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

www.mientayvn.com/chat_box_li.html

Giáo trình

LÝ THUYẾT HÀM GREEN Trong Vật Lý

TS. Vũ Quang Tuyên

*Bộ môn Vật lý lý thuyết, Khoa Vật lý
Đại học Khoa học tự nhiên tp. HCM*

2009

Hàm Green (HG) đã được khai sinh bởi nhà toán học Anh George Green năm 1828. Sau đó HG đã được ứng dụng bài toán điện từ và trở thành một công cụ toán học rất đặc lực và phổ biến để giải những phương trình vi phân không đồng nhất trong toán cũng như trong vật lý. Trong vật lý lượng tử, nhất là trong vật lý chất rắn, HG đã và đang là một công cụ rất quan trọng để nghiên cứu những hệ tương tác phức tạp.

Học phần lý thuyết HG này sẽ trình bày HG như là một phương pháp (toán học) để nghiên cứu vật lý. Hai chương sẽ trình bày phương pháp HG cho bài toán phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất- là lớp phương trình vi phân thường gặp trong vật lý. Hầu hết các ví dụ, bài toán được đưa vào trong những chương này đều có nối kết với các bài toán vật lý.

Từ chương 3 chúng tôi sẽ tập trung giới thiệu phương pháp HG trong vật lý lượng tử, đặc biệt trong trạng thái rắn. Sẽ giới hạn ở HG cân bằng nhiệt độ 0. Trong thực tế các thí nghiệm được thực hiện ở nhiệt độ khác không. Tuy nhiên một cách gần đúng ta có thể sử dụng HG cho những thí nghiệm ở nhiệt độ thấp hoặc những thí nghiệm có các đại lượng ta quan tâm không thay đổi nhanh theo nhiệt độ... Thực tế cho thấy HG nhiệt độ 0 đã được sử dụng để tính toán và giải thích thành công nhiều quá trình vật lý ở nhiệt độ hữu hạn.

Nếu cần xét đến ảnh hưởng của nhiệt độ, người ta cũng có thể sử dụng HG nhiệt độ hữu hạn Matsubara. Đối với hệ không cân bằng thì cần đến HG không cân bằng. Chúng tôi sẽ chỉ trình bày một số ý tưởng chính của các loại HG này để sinh viên (bậc cử nhân) nắm được hướng phát triển/mở rộng của HG trong vật lý lượng tử.

Học phần này nhằm giúp sinh viên nắm được i) phương pháp căn bản của HG trong bài toán phương trình vi phân không đồng nhất, ii) phương pháp tìm HG bằng hàm riêng và trị riêng, iii) định nghĩa và ý nghĩa của HG trong vật lý lượng tử, iv) phương pháp triển khai nhiễu loạn của HG và một số cách tính gần đúng của HG v) phương pháp giản đồ Feynman cho HG.

Tài liệu tham khảo

* Hàm Green và phương trình vi phân tuyến tính :

Duffy G. D. (2001): *Green's Function with Applications* (Chapman & Hall/CRC)

Tang K. T. (2006): *Mathematical Methods for Engineers and Scientists* (Springer, Berlin)

Michio Masujima (2005) : *Applied Mathematical Methods in Theoretical Physics* (Wiley)

* Hàm Green và ứng dụng vào vật lý lượng tử:

Abrikosov A. A., Gorkov L. P. Dzyaloshinski I. E. (1975) : *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover Publ., New York)

Doniach S., Sondheimer E. H. (1998) : *Green's Functions for Solid State Physicists* (Imperial College Press, London)

Economou E. N. (2006): *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag Berlin)

Enz C. P. (1992) : *A Course on Many-Body Theory Applied to Solid-State Physics* (World Scientific, Singapore)

Fetter A. L., Walecka J. D. (1971) : *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York)

Kadanoff L. P., Baym G. (1962): *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, Berlin)

Mahan G. D. (1981) : *Many-particle Physics* (Plenum, New York)

Nguyễn Văn Liên (2003): *Hàm Green trong Vật Lý Chất Rắn* (Đại Học QG Hà Nội)

* Lý thuyết điện từ cổ điển:

Jackson J. D. (1999) : *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York)

Chương 1

Dẫn nhập vào HG

Sinh viên vật lý thường hay tự hỏi tại sao cần học HG, đâu là lý do vật lý cho việc học này,... ? Để thấy được vai trò cũng như ý nghĩa của HG, trong chương này sẽ điềm lại vai trò của HG trong một số bài toán phổ biến trong vật lý (cổ điển); đồng thời cũng cho thấy trước mối tương quan trực tiếp của HG với những đại lượng vật lý có thể đo được trong thí nghiệm, qua đó giúp cho sinh viên, ngay từ đầu, “cảm nhận” được vai trò và ứng dụng “thiết thực” của HG trong vật lý (lượng tử).

1.1 HG trong vật lý cổ điển (HG cổ điển) :

1.1.1 Thế Coulomb :

HG đã được sử dụng phổ biến trong bài toán thế Coulomb tạo bởi điện tích điểm. Điện tích e định vị tại điềm có vector vị trí \vec{r}' sẽ tạo ra thế điềm $\phi(\vec{r})$ tại điềm \vec{r} được tính như sau :

$$\phi(\vec{r}) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (1.1.1)$$

Ta có thể mở rộng cho trường hợp nhiều điện tích điềm hoặc trường hợp phân bố liên tục với hàm phân bố điện tích $\rho(\vec{r})$. Trong trường hợp sau, thế năng là

$$\phi(\vec{r}) = \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}')}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (1.1.2)$$

Thế này thỏa mãn phương trình Poisson

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = -\rho(\vec{r}) / \epsilon_0. \quad (1.1.3)$$

Ta đưa vào HG được định nghĩa như sau :

$$G(R) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R} \text{ với } R = |\vec{r} - \vec{r}'|. \quad (1.1.4)$$

HG này thỏa phương trình Poisson đối với điện tích điểm và thế Coulomb được tính qua HG như sau :

$$\phi(\vec{r}) = \int d\vec{r}' G(R) \rho(\vec{r}') . \quad (1.1.5)$$

1.1.2 Phương trình điện từ trường (Maxwell) :

Xét phương trình Maxwell cho thế điện từ :

$$\begin{aligned} \square \vec{A} &\equiv \left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \vec{A}(\vec{r}, t) = -\mu \vec{j}(\vec{r}, t) \\ \square \phi &\equiv \left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \phi(\vec{r}, t) = -\rho(\vec{r}, t) / \varepsilon_0 . \end{aligned} \quad (1.1.6)$$

Người ta có thể giải hai phương trình trên bằng cách dùng HG $G(\vec{R}, T)$ thỏa phương trình

$$\square G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \equiv -\delta(\vec{R}) \delta(T) \quad (1.1.7)$$

và nghiệm của phương trình (1.6) được xác định qua HG dưới dạng

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\varepsilon_0} \int d\vec{r}' dt' G(\vec{R}, t - t') \rho(\vec{r}', t') \quad (1.1.8)$$

Xét một trường hợp đặc biệt : $G = \frac{\partial G}{\partial T} = 0$ tại $T=0$. Khi đó ta thu được HG có dạng

$$G(R, T) = \frac{c\theta(T)}{4\pi R} \{ \delta(R - cT) - \delta(R + cT) \} \quad (1.1.9)$$

Bởi vì R và T dương, số hạng cuối bằng 0 và có

$$G(R, T) = \frac{c}{4\pi R} \delta(R - cT) . \quad (1.1.10)$$

Thế điện trở thành

$$\phi(\vec{r}) = \frac{c}{4\pi\varepsilon_0} \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}', t - R/c) / R \quad (1.1.11)$$

và đây chính là dạng quen thuộc của thế trễ trong điện động lực học.

1.2 Hệ lượng tử :

Ở đây chỉ tóm tắt một số mối liên hệ giữa HG và những đại lượng vật lý có thể đo được trực tiếp hay gián tiếp trong thực nghiệm.

- Động năng, thế năng và năng lượng toàn phần được tính trực tiếp qua HG
- HG cho thông tin trực tiếp về mật độ hạt $\langle n(x) \rangle = \langle \psi^\dagger(x)\psi(x) \rangle$, mật độ dòng, mật độ spin,...
- HG cho thông tin trực tiếp về các hàm tương quan
- Các thông tin về tính chất phổ (năng lượng), mật độ trạng thái, tiết diện tán xạ được bao gồm trong HG trở.
- ...

Ngoài ra HG cho một lý thuyết nhiễu loạn rất hệ thống.

Chương 2

Hàm Green trong phương trình vi phân tuyến tính

Phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất là một bài toán rất thường gặp trong toán lý. Phương trình thế Coulomb, phương trình sóng, phương trình truyền nhiệt,... thuộc về dạng toán trên. Vì thế giải nghiệm của phương trình này là một việc rất quan trọng trong vật lý toán và HG đã chứng tỏ là một công cụ rất hiệu quả. Chương này sẽ trình bày phương pháp HG trong việc giải phương trình vi phân tuyến tính.

2.1 Phương trình vi phân tuyến tính :

Khảo sát các bài toán vật lý thường dẫn đến phương trình vi phân có dạng thức như sau :

$$Lu = f(x) . \quad (2.1.1)$$

Trong đó L là toán tử vi phân, $f(x)$ là hàm đã biết và u là nghiệm cần tìm. Với cái nhìn “vật lý” ta có thể xem hàm $f(x)$ bên vế phải của phương trình biểu diễn “lực”- tác động lên hệ, và nghiệm $u(x)$ của phương trình biểu diễn sự phản hồi của hệ.

* Ta chỉ xét toán tử tuyến tính, tức là L phải thỏa mãn

$$L(\alpha f + \beta g) = \alpha Lf + \beta Lg , \quad (2.1.2)$$

ở đây α và β là những số phức, f và g là hai hàm trong không gian hàm.

Vài ví dụ toán tử tuyến tính L :

- i) nhân bởi một hằng số vô hướng a : $Lu = au$
- ii) đạo hàm bậc n của một hàm (u) : $Lu = \frac{d^n}{dx^n}u$ hoặc $L = \frac{d^n}{dx^n}$ gọi là toán tử vi phân.

* Ngoài tính tuyến tính ta cũng chỉ xét đến những toán tử Hermite (còn gọi là toán tử “self-adjoint”), tức là $L^+ = L$. Ở đây L^+ được gọi là toán tử liên hợp của toán tử L và được định nghĩa:

$$\langle f | Lg \rangle = \langle L^+ f | g \rangle \quad (2.1.3)$$

Chú ý ta đã sử dụng định nghĩa tích trong: $\langle f | g \rangle \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)dx$ với f và g là những hàm xác định trên $[a, b]$, f^* là liên hiệp phức của f .

Thực tế,

Ví dụ : Tìm toán tử liên hiệp của $L = d^2 / dx^2$:

$$\langle f | Lg \rangle = \left\langle f \left| \frac{d^2}{dx^2} g \right. \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{d^2}{dx^2} g dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{d}{dx} \left[\frac{d}{dx} g \right] dx$$

Tích phân từng phần

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{d}{dx} \left[\frac{d}{dx} g \right] dx &= f \frac{dg}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{df^*}{dx} \right] \left[\frac{dg}{dx} \right] dx = \left[f \frac{dg}{dx} \right]_{-\infty}^{\infty} - \left[\frac{df}{dx} g \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d^2}{dx^2} f^* \right] g dx \\ &= \left[f \frac{dg}{dx} \right]_{-\infty}^{\infty} - \left[\frac{df}{dx} g \right]_{-\infty}^{\infty} + \left\langle \frac{d^2}{dx^2} f \middle| g \right\rangle \end{aligned}$$

Với điều kiện $f, g \rightarrow 0$ khi $x \rightarrow \pm\infty$ thì toán tử liên hiệp của $L = \frac{d^2}{dx^2}$ là $L^+ = \frac{d^2}{dx^2}$

thỏa mãn định nghĩa (2.1.3).

Nhận xét: trong trường hợp toán tử vi phân, thường gặp phải vấn đề phát sinh do bởi điều kiện biên. Thực vậy, như thấy trong ví dụ trên, vế phải của phương trình (2.1.3) có thể có những số hạng bổ sung liên quan đến các điều kiện biên của f và g . Nếu f và g có cùng điều kiện biên thì các số hạng biên sẽ khử nhau.

Tại sao quan tâm toán tử Hermit ? Ta đang xét bài toán vật lý. Trong vật lý lượng tử một đại lượng khảo sát được biểu diễn bởi toán tử O và giá trị kỳ vọng của đại lượng này được xác định bởi $\langle \psi | O\psi \rangle$ trong đó ψ là hàm sóng mô tả trạng thái của hệ đang xét. Như vậy $\langle \psi | O\psi \rangle$ phải thực, tức là

$$\langle \psi | O\psi \rangle^* = \langle \psi | O\psi \rangle$$

Bởi vì

$$\langle \psi | O\psi \rangle^* = \langle O\psi | \psi \rangle \quad (\text{tính chất của bra-ket : } \langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*)$$

ta có :

$$\langle O\psi | \psi \rangle = \langle \psi | O\psi \rangle$$

Như thế toán tử biểu diễn một đại lượng quan sát được phải là Hermite.

Tương tự như trong bài toán trị riêng của ma trận, ta cũng có bài toán trị riêng của toán tử vi phân :

$$L\phi_n = \lambda_n \phi_n, \quad (2.1.4)$$

với λ_n là một hằng số. Với một λ chọn trước, hàm số ϕ thỏa mãn (2.1.4) và điều kiện biên được gọi là hàm riêng tương ứng với λ ; λ được gọi là trị riêng. Đối với một toán tử Hermite, các trị riêng là số thực và các hàm riêng tạo thành hệ trực giao ($\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$) và đầy đủ ($\sum_k |\phi_k\rangle\langle \phi_k| = 1$).

2.2 Hàm Green và phương trình vi phân tuyến tính :

2.2.1 Phương pháp HG cho phương trình vi phân tuyến tính:

Trong phần này chúng ta sẽ trình bày cách dùng HG để tìm nghiệm phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất. Phương pháp HG có thể áp dụng cho những lớp phương trình vi phân phổ biến gồm cả phương trình vi phân thường và phương trình đạo hàm riêng phần (xem ví dụ *Duffy D. (2001)*).

Giả sử chúng ta muốn giải phương trình vi phân

$$Lu(x) = f(x), \quad (2.2.1)$$

trên miền xác định $x \in \Omega$, thỏa điều kiện biên cho trước và L là toán tử vi phân tuyến tính Hermite. Nhân hàm $G(x, x')$ (hàm chưa biết, nhưng đây chính là HG ta sẽ tính sau này) vào hai vế của (2.2.1) và lấy tích phân theo x trên miền Ω (tức là ta đang thực hiện tích trong ($\langle f | g \rangle = \int f^*(x)g(x)dx$) của cả hai vế phương trình (2.2.1) với hàm $G(x, x')$ theo biến x). Ta được :

$$\langle G(x, x') | Lu(x) \rangle = \langle G(x, x') | f(x) \rangle. \quad (2.2.2)$$

Với định nghĩa toán tử liên hiệp L^+ của L , như đã nhận xét về (2.1.3), vế trái của (2.2.2) có thể được viết lại như sau:

$$\langle G(x, x') | Lu(x) \rangle = \langle L^+ G(x, x') | u(x) \rangle + \text{số hạng biên}, \quad (2.2.3)$$

hay

$$\langle L^+ G(x, x') | u(x) \rangle = \langle G(x, x') | f(x) \rangle + \text{số hạng biên} \quad (2.2.4)$$

Bây giờ ta chọn hàm $G(x, x')$ thỏa mãn

$$L^+ G(x, x') = \delta(x - x'), \quad (2.2.5)$$

và với điều kiện biên được chọn thích hợp để khử đi tất cả những thành phần chưa được biết trong số hạng biên. Hàm $G(x, x')$ được gọi là HG.

Thay (2.2.5) vào phương trình (2.2.4) và lưu ý đến tính chất của hàm delta-Dirac, ta thu được :

$$u(x') = \langle G(x, x') | f(x) \rangle + \text{số hạng biên đã biết.} \quad (2.2.6)$$

Với $f(x)$ biết trước và *số hạng biên đã biết*, một khi tính được $G(x, x')$ ta sẽ tìm được nghiệm u . (2.2.6) có thể được viết lại như sau :

$$u(x) = \int_{\Omega} G(\xi, x) f(\xi) d\xi + \text{số hạng biên đã biết.} \quad (2.2.7)$$

Tóm lại để giải phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất $Lu = f(x)$ bằng HG, trước hết ta giải phương trình vi phân $L^+G(x, x') = \delta(x - x')$ với điều kiện biên chọn lựa thích hợp để tìm nghiệm $G(x, x')$. Sau đó ta sẽ có được nghiệm u của phương trình vi phân xác định qua (2.2.7).

2.2.2 Ý nghĩa vật lý của HG :

Hàm Green có thể được giải thích như sau. Nếu phương trình vi phân tuyến tính, ví dụ (2.2.1), mô tả hệ vật lý tuyến tính, thì nghiệm $u(x)$ biểu diễn sự phản hồi (tuyến tính) của hệ dưới sự kích thích của “lực” ngoài $f(x)$. Khi đó HG $G(x', x)$ biểu thị phản ứng của hệ vật lý đối với “lực” của một nguồn điểm tại điểm x' . Ta cũng có thể xem HG $G(x', x)$ như hàm truyền kích thích hoặc như hàm tương quan giữa lực kích thích và sự phản hồi của hệ.

2.2.3 Tính đối xứng của HG :

HG có tính đối xứng, còn gọi là tính chất đảo, nếu L là toán tử Hermite. Thật vậy, xét

$$LG(x, x') = \delta(x - x'), \quad (2.2.8)$$

$$LG(x, x'') = \delta(x - x''). \quad (2.2.9)$$

Lấy tích trong của (2.2.8) với $G(x, x'')$ từ bên trái và (2.2.9) với $G(x, x')$ từ bên phải :

$$\langle G(x, x''), LG(x, x') \rangle = \langle G(x, x''), \delta(x - x') \rangle,$$

$$\langle LG(x, x''), G(x, x') \rangle = \langle \delta(x - x''), G(x, x') \rangle.$$

Vì toán tử L là Hermite nên $\langle G(x, x''), LG(x, x') \rangle = \langle LG(x, x''), G(x, x') \rangle$. Từ hai phương trình trên có được $\langle G(x, x''), \delta(x - x') \rangle = \langle \delta(x - x''), G(x, x') \rangle$, tức là

$$G^*(x', x'') = G(x'', x'). \quad (2.2.10)$$

Đây là tính chất đảo của HG.

Nếu $G(x, x')$ là thực thì HG có tính đối xứng :

$$G(x', x'') = G(x'', x'), \quad (2.2.11)$$

2.3 Hàm Green cho phương vi phân không phụ thuộc thời gian:

Trong phần này ta sẽ khảo sát phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất không phụ thuộc thời gian. Bài toán I có tính minh họa phương pháp HG trình bày trong phần trên.

Trong bài toán II, khi dùng HG để giải phương trình vi phân, ta cũng giới thiệu phương pháp hàm riêng và trị riêng để tìm HG. Các kết quả thu được cho phép tìm hiểu những tính chất của HG cũng như ý nghĩa vật lý của nó.

2.3.1 HG không phụ thuộc thời gian I:

Ta hãy khảo sát phương trình Schrödinger 1 chiều với thế $U(x)$:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] \varphi(x) = U(x)\varphi(x) \quad (2.3.1)$$

và giả thiết $U(x) \rightarrow 0$ khi $x \rightarrow \pm\infty$. Giả sử các điều kiện biên :

$$\varphi(0) = a, \quad \varphi'(0) = b, \quad (2.3.2)$$

và quan tâm đến nghiệm với $x > 0$.

Viết lại phương trình (2.3.1) dưới dạng

$$L\varphi(x) = f(x) \quad (2.3.3)$$

với

$$L = \frac{d^2}{dx^2} + k^2, \quad f(x) = U(x)\varphi(x). \quad (2.3.4)$$

Hàm Green :

Nhân hai vế của (2.3.3) với $g(x, x')$ và lấy tích phân theo x từ 0 đến ∞ :

$$\int_0^{\infty} g(x, x')L\varphi(x)dx = \int_0^{\infty} g(x, x')f(x)dx. \quad (2.3.5)$$

Tích phân từng phần (hai lần) trên vế trái (2.3.5), thu được :

$$\int_0^{\infty} (Lg(x, x'))\varphi(x)dx + g(x, x')\varphi'(x)\Big|_{x=0}^{x=\infty} - \frac{dg(x, x')}{dx}\varphi(x)\Big|_{x=0}^{x=\infty} = \int_0^{\infty} g(x, x')f(x)dx \quad (2.3.6)$$

Trong các số hạng biên, $\varphi(0)$ và $\varphi'(0)$ đã biết. Để khử những số hạng biên chưa biết ($\varphi(\infty)$ và $\varphi'(\infty)$) đòi hỏi điều kiện biên cho $g(x, x')$:

$$g(\infty, x') = 0 \quad \text{và} \quad \frac{dg(\infty, x')}{dx} = 0. \quad (2.3.7)$$

Và chọn g thỏa phương trình

$$Lg(x, x') = \delta(x - x'). \quad (2.3.8)$$

Từ (2.3.6) ta tìm được :

$$\begin{aligned} \varphi(x') &= g(0, x')\varphi'(0) - \frac{dg(0, x')}{dx}\varphi(0) + \int_0^\infty g(x, x')f(x)dx \\ &= bg(0, x') - a\frac{dg(0, x')}{dx} + \int_0^\infty g(x, x')f(x)dx \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

Tìm nghiệm HG $g(x, x')$: viết lại phương trình cho HG dưới dạng :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] g(x, x') = \delta(x, x') \quad (2.3.10)$$

trên $x \in (0, \infty)$ với $x' \in (0, \infty)$ và điều kiện biên :

$$g(\infty, x') = 0 \quad (2.3.11)$$

$$\frac{dg(\infty, x')}{dx} = 0. \quad (2.3.12)$$

Đối với $x < x'$ ta có :

$$g(x, x') = A \sin(kx) + B \cos(kx). \quad (2.3.13)$$

Khi $x > x'$:

$$g(x, x') = C \sin(kx) + D \cos(kx). \quad (2.3.14)$$

Sử dụng các điều kiện biên (2.3.11) và (2.3.12) cho : $C = D = 0$. Vậy

$$g(x, x') = 0 \text{ với } x > x'. \quad (2.3.15)$$

Lấy tích phân hai vế của (2.3.10) theo x từ $x' - \varepsilon$ đến $x' + \varepsilon$ và lấy giới hạn $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x' - \varepsilon}^{x' + \varepsilon} \left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] g(x, x') dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x' - \varepsilon}^{x' + \varepsilon} \delta(x, x') dx. \quad (2.3.16)$$

Với đòi hỏi tính liên tục của $g(x, x')$ khi qua x' ta có :

$$g(x' + \varepsilon, x') = g(x' - \varepsilon, x') \quad (2.3.17)$$

và

$$\frac{dg(x' + \varepsilon, x')}{dx} - \frac{dg(x' - \varepsilon, x')}{dx} = 1. \quad (2.3.18)$$

Lấy $\varepsilon \rightarrow 0^+$ ta được hệ phương trình để xác định hệ số A và B trong (2.3.13) :

$$\begin{cases} A \sin kx' + B \cos kx' = 0 \\ -A \cos kx' + B \sin kx' = 1/k. \end{cases} \quad (2.3.19)$$

Hệ này cho kết quả :

$$A = -\frac{\cos kx'}{k} \text{ và } B = \frac{\sin kx'}{k} \quad (2.3.20)$$

và HG cần tìm là:

$$g(x, x') = \frac{\sin k(x - x')}{k} \text{ với } x < x' \text{ và } g(x, x') = 0 \text{ với } x > x'. \quad (2.3.21)$$

Hàm φ (2.3.9) trở thành :

$$\varphi(x') = a \cos kx' + b \frac{\sin kx'}{k} + \int_0^{x'} \frac{\sin k(x' - x)}{k} f(x) dx. \quad (2.3.22)$$

Ta có thể viết lại hàm φ cần tìm với $f(x) = U(x)\varphi(x)$ như sau :

$$\varphi(x) = a \cos kx + b \frac{\sin kx}{k} + \int_0^x \frac{\sin k(x - \xi)}{k} U(\xi)\varphi(\xi) d\xi. \quad (2.3.23)$$

Nhận xét: phương trình (2.3.23) là phương trình tích phân Volterra loại hai.

2.3.2 HG không phụ thuộc thời gian II:

Giả sử phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất (2.2.1) có dạng

$$[\lambda - \mathcal{L}(\vec{r})]\varphi(\vec{r}, \lambda) = f(\vec{r}) \quad (2.3.24)$$

trong đó $f(\vec{r})$ là hàm đã cho và λ là biến phức, nghiệm cần tìm $\varphi(\vec{r}, \lambda)$ thỏa mãn điều kiện biên trên S thuộc miền Ω chứa \vec{r} và \vec{r}' . $\mathcal{L}(\vec{r})$ là toán tử vi phân tuyến tính Hermite và không phụ thuộc thời gian t .

Để giải (2.3.24) ta định nghĩa $G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda)$ là nghiệm của phương trình vi phân không đồng nhất

$$[\lambda - \mathcal{L}(\vec{r})]G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.3.25)$$

cũng thỏa mãn điều kiện biên như (2.3.24).

Ta có thể viết phương trình (2.3.25) dưới dạng Dirac

$$[\lambda - \mathcal{L}]G(\lambda) = 1. \quad (2.3.26)$$

Để tìm nghiệm của (2.3.26), ta xét bài toán hàm riêng và trị riêng của toán tử \mathcal{L} .

Gọi $|\phi_n\rangle$ và E_n là hàm riêng và trị riêng của \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle. \quad (2.3.27)$$

Các hàm riêng này sẽ tạo hệ đầy đủ và trực giao và trị riêng E_n là thực.

i) Giả sử λ không thuộc phổ trị riêng của \mathcal{L} , khi đó các trị riêng của $[\lambda - \mathcal{L}]$ khác 0, từ (2.3.26) ta tính được HG như sau:

$$G(\lambda) = \frac{1}{\lambda - \mathcal{L}} = \sum_n \frac{1}{\lambda - E_n} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{\lambda - E_n}. \quad (2.3.28)$$

Nếu phổ của toán tử \mathcal{L} gồm cả gián đoạn và liên tục thì HG (2.3.28) được viết dưới dạng tổng quát

$$G(\lambda) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{\lambda - E_n} + \int \frac{|\phi_E\rangle\langle\phi_E|}{\lambda - E} dE \quad (2.3.29)$$

hoặc trong \vec{r} -biểu diễn:

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = \sum_n \frac{\phi_n(\vec{r})\phi_n^*(\vec{r}')}{\lambda - E_n} + \int \frac{\phi_E(\vec{r})\phi_E^*(\vec{r}')}{\lambda - E} dE. \quad (2.3.30)$$

Nghiệm $\varphi(\vec{r}, \lambda)$ của phương trình vi phân (2.3.24) được tính qua HG $G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda)$ và có dạng :

$$\varphi(\vec{r}, \lambda) = \int G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) f(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.3.31)$$

ii) Xét trường hợp λ thuộc phổ trị riêng của \mathcal{L} . Tại những điểm $\lambda = E_n$ hàm Green $G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda)$ không xác định. Khi đó phương trình (2.3.24) không có lời giải ngoại trừ trường hợp hàm $f(\vec{r})$ trực giao với tất cả các hàm riêng $|\phi_n\rangle$ tương ứng với trị riêng E_n . Thật vậy, ta viết lại phương trình (2.3.24) với $\lambda = E_n$ dưới dạng Dirac

$$[E_n - \mathcal{L}]|\varphi_\lambda\rangle = |f\rangle, \quad (2.3.32)$$

nhân $\langle\phi_n|$ với hai vế và lấy tích phân theo \vec{r} ta được

$$\langle\phi_n|[E_n - \mathcal{L}]|\varphi_\lambda\rangle = [E_n - E_n]\langle\phi_n|\varphi_\lambda\rangle = \langle\phi_n|f\rangle. \quad (2.3.33)$$

Để phương trình có nghiệm ta cần $\langle\phi_n|f\rangle$ phải bằng 0 với mọi $\langle\phi_n|$, tức là $f(\vec{r})$ trực giao với tất cả các hàm riêng.

Đối với phổ liên tục, $G(\lambda)$ không xác định trên miền ở đó $\lambda = E$, nhưng luôn giải tích tại lân cận trên $\lambda = E + i\varepsilon$ và lân cận dưới $\lambda = E - i\varepsilon$ với mọi $\varepsilon > 0$. Ta đưa vào hàm giới hạn được định nghĩa

$$G^+(\vec{r}, \vec{r}', E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0_+} G(\vec{r}, \vec{r}', E + i\varepsilon), \quad (2.3.34)$$

$$G^-(\vec{r}, \vec{r}', E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0_+} G(\vec{r}, \vec{r}', E - i\varepsilon). \quad (2.3.35)$$

Những giới hạn trên luôn tồn tại. Khi λ trùng với trị riêng E trong miền phổ liên tục, nghiệm của phương trình vi phân không thuần nhất được xác định qua hàm giới hạn G^\pm như sau :

$$\varphi(\vec{r}, \lambda) = \varphi_0(\vec{r}, \lambda) + \int G^\pm(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) f(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (2.3.36)$$

trong đó φ_0 là nghiệm của phương trình vi phân thuần nhất $[\lambda - \mathcal{L}(\vec{r})]\varphi_0(\vec{r}, \lambda) = 0$.

2.3.3 Tính chất và nghĩa của HG:

- Từ (2.3.30) ta tìm lại tính chất đảo của HG:

$$G^*(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = G(\vec{r}', \vec{r}, \lambda^*) \quad (2.3.37)$$

Về ý nghĩa vật lý, điều này cho thấy phản hồi tại \vec{r} đối với nguồn điểm tại \vec{r}' bằng với phản hồi tại \vec{r}' đối với nguồn điểm tại \vec{r} .

- Trị riêng của toán tử Hermite \mathcal{L} là thực \rightarrow HG $G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda)$ giải tích khắp trên mặt phẳng phức λ ngoại trừ những điểm (miền) kỳ dị trên trục thực có λ trùng với trị riêng E_n (E) của \mathcal{L} . Tại những điểm λ trên trục thực không trùng với trị riêng của \mathcal{L} , HG $G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda)$ là Hermite vì từ (2.3.37) ta có $G^*(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = G(\vec{r}', \vec{r}, \lambda)$; và khi đó $G(\vec{r}, \vec{r}, \lambda)$ là thực.

- Các cực của HG xác định phổ trị riêng gián đoạn của toán tử \mathcal{L} .
- Thặng dư của HG tại các cực đơn cho thông tin về hàm riêng của \mathcal{L} :

$$\text{Res}\{G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda)\}_{E_n} = \phi_n(\vec{r})\phi_n^*(\vec{r}'), \quad (2.3.38)$$

$$\text{Res}\{G(\vec{r}, \vec{r}, \lambda)\}_{E_n} = |\phi_n(\vec{r})|^2. \quad (2.3.39)$$

- Trong trường hợp phổ liên tục của \mathcal{L} : G^+ khác G^- và như vậy tồn tại một cắt nhánh dọc theo trục thực mô tả phổ liên tục ứng với trạng thái lan truyền.
- Hàm giới hạn có mối liên hệ sau:

$$G^-(\vec{r}, \vec{r}', E) = [G^+(\vec{r}', \vec{r}, E)]^*, \quad (2.3.40)$$

tức là

$$\text{Re}[G^-(\vec{r}, \vec{r}', E)] = \text{Re}[G^+(\vec{r}', \vec{r}, E)], \quad (2.3.41)$$

$$\text{Im}[G^-(\vec{r}, \vec{r}', E)] = -\text{Im}[G^+(\vec{r}', \vec{r}, E)], \quad (2.3.42)$$

Người ta cũng quan tâm đến hàm \tilde{G} định nghĩa như sau:

$$\tilde{G}(\vec{r}, \vec{r}', E) = G^+(\vec{r}, \vec{r}', E) - G^-(\vec{r}, \vec{r}', E) \quad (2.3.43)$$

khi đó:

$$\tilde{G}(\vec{r}, \vec{r}', E) = 2i \text{Im}[G^+(\vec{r}, \vec{r}', E)] = -2i \text{Im}[G^-(\vec{r}, \vec{r}', E)]. \quad (2.3.44)$$

- Gọi $N(E)$ là mật độ trạng thái (số trạng thái trong một đơn vị năng lượng, $N(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$) và $\rho(\vec{r}, E)$ là mật độ trạng thái trên một đơn vị thể tích ($\int \rho(\vec{r}, E) d\vec{r} = N(E)$). Như sẽ thấy dưới đây, các hàm G^\pm và \tilde{G} cho ta thông tin về $N(E)$ và $\rho(\vec{r}, E)$.

Sử dụng đồng nhất thức Dirac

$$\frac{1}{x - x_0 \pm i0^+} = P \left(\frac{1}{x - x_0} \right) \mp i\pi \delta(x - x_0) \quad (2.3.45)$$

cho G^\pm (chú ý đến (2.3.28)) ta được :

$$G^\pm(\vec{r}, \vec{r}', E) = P \sum_n \frac{\phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}')}{E - E_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') \quad (2.3.46)$$

và

$$\tilde{G}(\vec{r}, \vec{r}', E) = -2i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}'). \quad (2.3.47)$$

Lấy vết (trace, ký hiệu Tr) của các yếu tố chéo $G^\pm(\vec{r}, \vec{r}, E)$ của (2.3.46) cho :

$$\text{Tr}G^\pm(E) = \sum_n \langle \phi_n | G^\pm(E) | \phi_n \rangle = P \sum_n \frac{1}{E - E_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \quad (2.3.48)$$

hay

$$N(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\text{Tr}G^\pm(E) \right]. \quad (2.3.49)$$

Hàm mật độ trạng thái có thể viết dưới dạng :

$$\rho(\vec{r}, E) = \sum_n \delta(E - E_n) \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}) \quad (2.3.50)$$

Khi đó ta có

$$\rho(\vec{r}, E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[G^\pm(\vec{r}, \vec{r}, E) \right] \quad (2.3.51)$$

Hoặc

$$\rho(\vec{r}, E) = \mp \frac{1}{2i\pi} \tilde{G}(\vec{r}, \vec{r}, E). \quad (2.3.52)$$

- HG G có thể được biểu diễn qua \tilde{G} hoặc $\rho(\vec{r}, E)$:

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) &= \sum_n \frac{\phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}')}{\lambda - E_n} = \int dE \sum_n \delta(E - E_n) \frac{\phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}')}{\lambda - E} \\ &= \frac{i}{2\pi} \int dE \frac{\tilde{G}(\vec{r}, \vec{r}', E)}{\lambda - E} \end{aligned} \quad (2.3.53)$$

và

$$G(\vec{r}, \vec{r}, \lambda) = \int dE \frac{\rho(\vec{r}, E)}{\lambda - E} \quad (2.3.54)$$

2.3.4 Ví dụ:

Xét toán tử $\mathcal{L} = -\nabla^2$ trên V là \mathbb{R}^3 . Điều kiện biên là các hàm riêng của \mathcal{L} phải hữu hạn ở vô cùng. Ta sẽ tìm HG cho phương trình vi phân (2.3.25) với toán tử trên.

Phương trình cho HG :

$$[\lambda + \nabla^2]G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.3.55)$$

Phương trình Schrödinger của hạt tự do $-(\hbar^2/2m)\nabla^2\psi = E\psi$ (với năng lượng $E = p^2/2m$) cho ta biết toán tử $\mathcal{L} = -\nabla^2$ có trị riêng và hàm riêng

$$E = p^2/\hbar^2 \equiv k^2, \quad (2.3.56)$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (2.3.57)$$

HG cần tìm được cho bởi (2.3.30) có dạng :

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = \sum_{\vec{k}} \frac{\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{r}' \rangle}{\lambda - k^2} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}')}{\lambda - k^2} d\vec{k} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{\lambda - k^2} d\vec{k} \quad (2.3.58)$$

Ta đã sử dụng : $\sum_{\vec{k}} \dots \rightarrow \frac{L^D}{(2\pi)^D} \int d\vec{k} \dots$ với D là số chiều của không gian. Ở đây $D=3$.

Với $\vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r}'$ và gọi θ là góc giữa $\vec{\rho}$ và \vec{k} thì

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{k^2 dk}{\lambda - k^2} \int d\theta \sin \theta e^{ik\rho \cos \theta} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\lambda - k^2} \frac{e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}}{ik\rho} \\ &= \frac{1}{i4\pi^2 \rho} \int_{-\infty}^\infty \frac{k dk}{\lambda - k^2} e^{ik\rho} \end{aligned} \quad (2.3.59)$$

Trong trường hợp λ không thuộc phổ của \mathcal{L} , với $\text{Im}[\sqrt{\lambda}] > 0$, tích phân nhờ định lý thặng dư cho

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \lambda) = -\frac{1}{4\pi\rho} e^{i\sqrt{\lambda}\rho} = -\frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{i\sqrt{\lambda}|\vec{r}-\vec{r}'|}. \quad (2.3.60)$$

Nếu λ thuộc phổ của \mathcal{L} , $\lambda = E$, HG được xác định qua các hàm giới hạn (2.3.34) và (2.3.35), ta có :

$$G^\pm(\vec{r}, \vec{r}', E) = \frac{e^{\pm i\sqrt{E}|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}; E \geq 0. \quad (2.3.61)$$

Xét trường hợp $\lambda=0$, phương trình (2.3.55) chuyển về dạng Laplace :

$$\nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.3.62)$$

với nghiệm là

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (2.3.63)$$

Phương trình vi phân không thuần nhất tương ứng với HG này là phương trình Poisson cho thế tĩnh điện φ :

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = -4\pi \rho(\vec{r}). \quad (2.3.64)$$

Thế tĩnh được xác định qua HG và có dạng :

$$\varphi(\vec{r}) = -4\pi \int d\vec{r}' G(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') = \int \frac{d\vec{r}' \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.3.65)$$

2.4 Hàm Green cho phương trình vi phân phụ thuộc thời gian:

2.4.1 Phương trình vi phân chứa đạo hàm bậc I và Hàm Green

Xét phương trình vi phân không đồng nhất phụ thuộc thời gian có dạng

$$\left[\frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}, t) = f(\vec{r}, t) \quad (2.4.1)$$

và phương trình đồng nhất tương ứng

$$\left[\frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.4.2)$$

với c là hằng số dương và \mathcal{L} là toán tử vi phân tuyến tính Hermite. Nghiệm $\varphi(\vec{r}, t)$ của (2.4.1) có thể được tính qua HG tương ứng thỏa phương trình

$$\left[\frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] g(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (2.4.3)$$

Ở đây các hàm $\varphi(\vec{r}, t)$, $\phi(\vec{r}, t)$ và $g(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ thỏa cùng điều kiện biên.

Phương pháp chung để tính $g(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ là chuyển phương trình phụ thuộc thời gian (2.4.3) sang dạng không phụ thuộc thời gian (2.3.25) bằng phép biến đổi Fourier như sau :

$$g(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} g(\omega). \quad (2.4.4)$$

Ta đã đặt $g(\tau) \equiv g(t - t') = g(t, t')$ (để gọn các biến \vec{r}, \vec{r}' tạm thời để ẩn) vì phương trình (2.4.3) cho thấy g phụ thuộc hai biến thời gian dưới dạng $t - t'$. Thay $g(\tau)$ vào (2.4.3) ta được

$$\left[\frac{\omega}{c} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] g(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.4.5)$$

Đây chính là phương trình cho hàm Green G không phụ thuộc thời gian đã được khảo sát ở mục trước. Như vậy

$$g(\omega) = G(\omega/c), \quad (2.4.6)$$

trong đó $G(\lambda)$ (với $\lambda = \omega/c$) là nghiệm của phương trình (2.3.25). Dùng phép biến đổi Fourier (2.4.4) ta sẽ tìm được $G(\vec{r}, \vec{r}', \tau)$; và từ đó tính hàm $\varphi(\vec{r}, t)$. Tuy nhiên cần chú ý rằng, tương tự hàm $G(\lambda)$, hàm $g(\omega)$ cũng không giải tích ở một số điểm gián đoạn hay cắt nhánh trên trục thực. Do đó không thể lấy tích phân (2.4.4) trên trục thực, tức là không thể tính $\varphi(\vec{r}, t)$ trực tiếp từ hàm $g(\tau)$ trên miền thuộc phổ của \mathcal{L} - miền có ý nghĩa vật lý vì chứa những thông tin vật lý.

Như vậy ta cần đến các hàm giới hạn của $g(\tau)$ (PT. (2.4.4)) trong đó tích phân được lấy trên đường P_ω có giới hạn đến trục thực P_R :

$$g^{P_\omega}(\tau) = \lim_{P_\omega \rightarrow P_R} \frac{1}{2\pi} \int_{P_\omega} d\omega e^{-i\omega\tau} G^{P_\omega}(\omega/c). \quad (2.4.7)$$

Ta chỉ quan tâm đến hai cách chọn có ý nghĩa vật lý tương ứng với hai hàm giới hạn G^\pm đã được định nghĩa ở (2.3.34) và (2.3.35) :

$$g^\pm(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G^\pm(\omega/c), \quad (2.4.8)$$

Với

$$G^\pm(\omega/c) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{\omega/c - E_n \pm i\varepsilon}. \quad (2.4.9)$$

Từ mối liên hệ của G^\pm (2.3.40) ta cũng có hệ thức giữa hai hàm giới hạn g^\pm :

$$g^-(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = \left[g^+(\vec{r}', \vec{r}, -\tau) \right]^*. \quad (2.4.10)$$

Và tương tự hàm \tilde{G} trong (2.3.43) ta cũng đưa ra hàm \tilde{g} được định nghĩa :

$$\tilde{g}(\tau) = g^+(\tau) - g^-(\tau). \quad (2.4.11)$$

Hoặc sử dụng tính chất (2.3.47) của hàm \tilde{G} ta tính được :

$$\begin{aligned}
\tilde{g}(\tau) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} \tilde{G}(\omega/c) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} (-2\pi i) \sum_n \delta(\omega/c - E_n) |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \\
&= -ic \sum_n e^{-icE_n\tau} |\phi_n\rangle\langle\phi_n|.
\end{aligned} \tag{2.4.12}$$

Ta có thể viết lại (2.4.12) dưới dạng Dirac như sau:

$$\begin{aligned}
\tilde{g}(\tau) &= -ice^{-ic\mathcal{L}\tau} \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = -ice^{-ic\mathcal{L}\tau} \\
&= -icU(\tau)
\end{aligned} \tag{2.4.13}$$

Trong đó ta đã định nghĩa

$$U(t-t') = e^{-ic\mathcal{L}(t-t')} \tag{2.4.14}$$

và chính là toán tử tiến hóa :

$$|\phi(t)\rangle = U(t-t') |\phi(t')\rangle, \tag{2.4.15}$$

với $|\phi(t)\rangle$ là nghiệm của phương trình đồng nhất (2.4.2). Như vậy nghiệm của phương trình vi phân đồng nhất có thể được biểu diễn qua HG \tilde{g} , trong \vec{r} -biểu diễn ta có:

$$\phi(r,t) = \frac{i}{c} \int \tilde{g}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \phi(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt' \tag{2.4.16}$$

Chú ý rằng giữa \tilde{g} và g^+ hoặc g^- có mối liên hệ trực tiếp. Thật vậy, hãy khảo sát tích phân (2.4.8). Thay (2.4.9) vào (2.4.8) và chuyển sang tích phân chu tuyến đóng là nửa hình tròn C_- (hoặc C_+) bán kính vô hạn thuộc nửa mặt phẳng dưới (hoặc trên) nếu $\tau > 0$ (hoặc $\tau < 0$). Với cách chọn như thế tích phân trên chu tuyến ở vô cực bằng 0. Bằng việc sử dụng định lý thặng dư và định lý Cauchy mở rộng để đánh giá tích phân chu tuyến và với định nghĩa (2.4.11) ta tìm được

$$g^\pm(\tau) = \pm\theta(\pm\tau) \tilde{g}(\tau), \tag{2.4.17}$$

với $\theta(\tau) = 1$ nếu $\tau > 0$ và $\theta(\tau) = 0$ nếu $\tau < 0$.

Tương tự (2.3.36), nghiệm của phương trình vi phân không đồng nhất (2.4.1) được tính qua HG g^+ hoặc \tilde{g} như sau :

$$\varphi(r,t) = \phi(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^t dt' g^+(\vec{r}, \vec{r}', t-t') f(\vec{r}', t') \tag{2.4.18}$$

2.4.2 Phương trình vi phân chứa đạo hàm bậc II và Hàm Green

Phần này trình bày tóm tắt phương pháp HG của phương trình vi phân chứa đạo hàm bậc hai theo thời gian. Xét phương trình không đồng nhất

$$\left[-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}, t) = f(\vec{r}, t) \quad (2.4.19)$$

và phương trình đồng nhất

$$\left[-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}, t) = 0. \quad (2.4.20)$$

HG tương ứng thỏa phương trình

$$\left[-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] g(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \quad (2.4.21)$$

trong đó các hàm $g(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$, $\varphi(\vec{r}, t)$ và $\phi(\vec{r}, t)$ thỏa cùng điều kiện biên trên mặt S bao \vec{r} và \vec{r}' .

Để tìm $g(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ ta dùng phép biến đổi Fourier chuyển phương trình (2.4.21) sang dạng không phụ thuộc thời gian. Chú ý đến sự phụ thuộc của HG vào $t-t'$, ta có:

$$g(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} g(\omega). \quad (2.4.22)$$

Thay vào (2.4.21) thu được :

$$\left[\frac{\omega^2}{c^2} - \mathcal{L}(\vec{r}) \right] g(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.4.23)$$

Như vậy

$$g(\omega) = G(\omega^2 / c^2) \quad (2.4.24)$$

với $G(\lambda)$ là nghiệm của (2.3.26) với $\lambda = \omega^2 / c^2$.

Tương tự $G(\lambda)$, HG $g(\omega)$ cũng không giải tích tại những điểm trên trục thực có ω^2 / c^2 trùng với trị riêng E của \mathcal{L} . Nếu $E < 0$ thì các cực của $g(\omega)$ là phức. Tuy nhiên ta chỉ quan tâm đến trường hợp các điểm kỳ dị thuộc trục thực.

Người ta cũng định nghĩa các hàm giới hạn tương tự (2.4.7) và tùy vào đường lấy tích phân chọn ra những hàm có ý nghĩa vật lý như sau :

* HG nhân quả :

$$g^c(\tau) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G(\omega^2 / c^2 + i\varepsilon) \quad (2.4.25)$$

* HG trễ:

$$g^r(\tau) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G(\omega^2/c^2 + i\varepsilon \text{Sign}(\omega)) \quad (2.4.26)$$

* HG sớm:

$$g^a(\tau) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G(\omega^2/c^2 - i\varepsilon \text{Sign}(\omega)) \quad (2.4.27)$$

Trong đó

$$\text{Sign}(\omega) = \begin{cases} +1, & \omega > 0 \\ -1, & \omega < 0 \end{cases}$$

Ngoài ra ta cũng định nghĩa hàm \tilde{g}

$$\tilde{g}(\tau) = g^r(\tau) - g^a(\tau) \quad (2.4.28)$$

và tìm được :

$$\tilde{g}(\tau) = -c \sum_n \frac{\sin(c\sqrt{E_n}\tau)}{\sqrt{E_n}} |\phi_n\rangle\langle\phi_n|, \quad (2.4.29)$$

hoặc dưới dạng toán tử :

$$\tilde{g}(\tau) = -c \frac{\sin(c\sqrt{\mathcal{L}}\tau)}{\sqrt{\mathcal{L}}} \text{ với } \tau = t - t'. \quad (2.4.30)$$

Nghiệm của phương trình vi phân không đồng nhất được biểu diễn qua HG như sau :

$$\begin{aligned} \varphi(r, t) &= \phi(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^t dt' g^r(\vec{r}, \vec{r}', t - t') f(\vec{r}', t') \\ &= \phi(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^t dt' \tilde{g}(\vec{r}, \vec{r}', t - t') f(\vec{r}', t'), \end{aligned} \quad (2.4.31)$$

với $\phi(\vec{r}, t)$ là nghiệm của phương trình đồng nhất tương ứng.

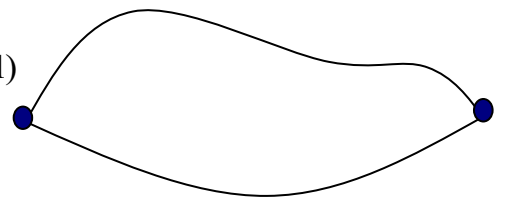
Bài tập

Bằng phương pháp HG hãy tìm độ dịch chuyển $u(x)$ của sợi dây (hai đầu cố định) dưới tác động của lực phân bố $f(x)$ cho trước.

Phương trình xác định $u(x)$ cho bởi

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = f(x), \quad x \in (0, 1)$$

với điều kiện biên : $u(0) = 0$ và $u(1) = 0$



Chương 3

Hàm Green trong Vật lý lượng tử

HG đã trình bày ở chương trước chỉ thuận lợi cho bài toán một hạt trong trường (lực) ngoài, trong đó ta có thể xác định HG trực tiếp qua trị riêng và hàm riêng (của toán tử \mathcal{L} - ví dụ đó là toán tử Hamilton H). Trong hệ nhiều hạt thực tế cần phải xét đến tương tác giữa các hạt và khi đó về nguyên tắc không xác định được trị và hàm riêng của \mathcal{H} . Do đó cần một hình thức luận HG mở rộng hơn, dĩ nhiên thường là gần đúng, không dựa vào thông tin trực tiếp của hàm và trị riêng.

Chương này sẽ dẫn ra HG được xây dựng trên toán tử trường trong lượng tử hóa lần II. Để chuẩn bị việc dẫn xuất cho HG như thế, trước hết chúng ta sẽ trình bày lại một số kiến thức về các biểu diễn và S-ma trận.

3.1 Các biểu diễn :

Để mô tả sự phụ thuộc thời gian của các hệ vật lý, trong cơ lượng tử người ta thường dùng một trong ba biểu diễn, cũng thường gọi là bức tranh, tương đương sau: biểu diễn Schrödinger, biểu diễn Heisenberg, biểu diễn tương tác (còn gọi là biểu diễn Dirac).

3.1.1 Biểu diễn Schrödinger:

Trong bức tranh Schrödinger (một số tài liệu còn thêm tên gọi khác là bức tranh trạng thái)

toán tử độc lập với thời gian : H

hàm sóng hay vector trạng thái phụ thuộc vào thời gian : $|\psi_S(t)\rangle$

Từ cơ lượng tử ta có phương trình chuyển động :

- đối với những trạng thái “thuần khiết” $|\psi_S(t)\rangle$ trong hệ cơ lượng tử:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_S(t)\rangle = H |\psi_S(t)\rangle \quad (3.1.1)$$

- và đối với những trạng thái “pha trộn” $\rho_S(t)$ (dùng cho hệ vĩ mô được mô tả một cách thống kê):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_S(t) = [\rho_S(t), H]_- \quad (3.1.2)$$

$\rho_S(t)$ thường được gọi là ma trận mật độ và có những tính chất sau:

i)
$$\rho_S = \sum_m p_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m|, \quad (3.1.3)$$

với p_m là xác suất để hệ ở trong trạng thái $|\psi_m\rangle$,

- ii) giá trị kỳ vọng của đại lượng khảo sát $\langle A \rangle$ tương ứng với toán tử A được xác định

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho_S A) \quad (3.1.4)$$

($\text{Tr}(A)$: vết của A . Đôi khi người ta cũng dùng ký hiệu Sp thay cho Tr), và

iii)
$$\text{Tr}(\rho_S) = 1. \quad (3.1.5)$$

Phương trình (3.1.1) cho nghiệm hình thức :

$$|\psi_S(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} |\psi_S(t_0)\rangle \quad (3.1.6)$$

với t_0 là thời điểm cố định nào đó và người ta thường chọn $t_0 = 0$.

3.1.2 Bức tranh Heisenberg:

Bức tranh Heisenberg (đôi lúc còn có tên gọi bức tranh toán tử) mô tả bài toán cơ lượng tử bằng cách xét

hàm sóng (vector trạng thái) không đổi theo thời gian : $|\psi_H\rangle$,

trong khi toán tử phụ thuộc thời gian : $O(t)$.

Sự phụ thuộc vào thời gian của toán tử được xác định như sau

$$A_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} A_H(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \quad (3.1.7)$$

hoặc chọn $t_0 = 0$:

$$A_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A_H(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \left(= e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A_S e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \right). \quad (3.1.8)$$

Ta cũng có thể viết lại (3.1.8) dưới dạng phương trình chuyển động :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A(t) = [A(t), H]_- \quad (3.1.9)$$

Sự tương đương giữa bức tranh Schrödinger và Heisenberg : hãy xét phần tử ma trận mô tả sự chuyển dời giữa hai trạng thái 1 và 2 :

- trong bức tranh Schrödinger phần tử ma trận của toán tử A là :

$$\langle \psi_1^+(t) A(0) \psi_2(t) \rangle = \langle \psi_1^+(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_2(0) \rangle, \quad (3.1.10)$$

- trong bức tranh Heisenberg ta có :

$$\langle \psi_1^+(0) A(t) \psi_2(0) \rangle = \langle \psi_1^+(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_2(0) \rangle. \quad (3.1.11)$$

Như vậy hai bức tranh cho cùng phần tử ma trận- chúng tương đương nhau.

3.1.3 Biểu diễn tương tác (biểu diễn Dirac):

Biểu diễn tương tác được xem như loại trung gian của hai biểu diễn trên. Trong biểu diễn này *toán tử và vector trạng thái đều phụ thuộc thời gian*.

Xét toán tử Hamilton H của hệ. Ta chia toán tử H thành hai phần :

$$H = H_0 + W. \quad (3.1.12)$$

Ở đây toán tử H_0 là phần không nhiễu loạn và thường được chọn sao cho có thể giải chính xác. W là thế tương tác phụ thuộc thời gian.

Sự phụ thuộc thời gian của hàm sóng và toán tử trong bức tranh tương tác được xác định như sau :

$$A_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} A(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}, \quad (3.1.13)$$

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi_I(0)\rangle. \quad (3.1.14)$$

Đối với vector trạng thái, ta viết lại (3.1.14) dưới dạng phương trình chuyển động :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle &= i e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} (H_0 - H) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi_I(0)\rangle \\ &= -i \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}}_{V(t)} \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi_I(0)\rangle}_{|\psi_I(t)\rangle} \end{aligned}$$

Như vậy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = V(t) |\psi_I(t)\rangle. \quad (3.1.15)$$

Phương trình chuyển động (3.1.15) cho thấy thế tương tác phụ thuộc thời gian $W(t)$ quy định sự thay đổi theo thời gian của vector trạng thái, trong khi sự phụ thuộc thời gian của toán tử được quyết định bởi phần Hamilton không nhiễu loạn H_0 .

Chú ý rằng với tính phụ thuộc thời gian (3.1.13) và (3.1.14), nếu xét phần tử ma trận chuyển dời giữa hai trạng thái $\langle \psi_1^+(t) A(t) \psi_2(t) \rangle$, sẽ tìm thấy sự tương đương giữa biểu diễn tương tác và hai biểu diễn trên.

Toán tử tiến hóa : Trong (3.1.14) đặt

$$U(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iHt}{\hbar}}, \quad (3.1.16)$$

ta có $|\psi_I(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$. Như vậy $U(t)$ là một toán tử tiến hóa thời gian: dưới tác động của nó vector trạng thái tại 0 tiến sang trạng thái tại t . Toán tử này có đặc tính :

$$U(0) = 1$$

và tuân theo phương trình

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = W(t)U(t). \quad (3.1.17)$$

Nghiệm của (3.1.17) là

$$U(t) - U(0) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 W(t_1)U(t_1)$$

hoặc

$$U(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 W(t_1)U(t_1). \quad (3.1.18)$$

Bằng phép tính lặp cho (3.1.18) ta có thể biểu diễn $U(t)$ thành chuỗi vô hạn :

$$\begin{aligned} U(t) &= 1 - i \int_0^t dt_1 W(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 W(t_1)W(t_2) + \dots \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t) \end{aligned} \quad (3.1.19)$$

$$\text{trong đó} \quad U^{(n)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n W(t_1)W(t_2)\dots W(t_n) \quad (3.1.20)$$

($t \geq t_1 \geq t_2 \dots \geq t_n \geq t_0$).

Với toán tử thời trình (toán tử trình tự thời gian) T được định nghĩa

$$T[W(t_1)W(t_2)] = \begin{cases} W(t_1)W(t_2), & t_1 > t_2 \\ W(t_2)W(t_1), & t_2 > t_1 \end{cases} \quad (3.1.21)$$

$$\text{hoặc} \quad T[W(t_1)W(t_2)] = \theta(t_1 - t_2)W(t_1)W(t_2) + \theta(t_2 - t_1)W(t_2)W(t_1) \quad (3.1.22)$$

(θ là hàm bước nhảy), ta có thể viết lại chuỗi của toán tử tiến hóa như sau :

$$U(t) = 1 + \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n T[W(t_1) \dots W(t_n)]. \quad (3.1.23)$$

Chuỗi trên là khai triển của hàm e lũy thừa và như vậy ta có dạng viết gọn của toán tử tiến hóa :

$$U(t) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 W(t_1) \right]. \quad (3.1.24)$$

3.2 S-ma trận :

S ma trận có mối liên hệ trực tiếp với toán tử tiến hóa vừa khảo sát trên và có tương quan chặt chẽ với biên độ xác suất chuyển dời, với tiết diện tán xạ của các tương tác khác nhau. S ma trận được định nghĩa như là toán tử thay đổi vector trạng thái $|\psi_I(t')\rangle$ thành trạng thái $|\psi_I(t)\rangle$:

$$|\psi_I(t)\rangle = S(t, t') |\psi_I(t')\rangle. \quad (3.1.25)$$

S ma trận có những tính chất sau

$$i) \quad S(t, t') = U(t)U^+(t') \quad (3.1.26)$$

(Sử dụng định nghĩa toán tử tiến hóa

$$|\psi_I(t)\rangle = U(t) |\psi_I(0)\rangle$$

cho $|\psi_I(t')\rangle$ trong (3.1.25) ta có

$$|\psi_I(t)\rangle = S(t, t')U(t') |\psi_I(0)\rangle.$$

Từ đây ta được mối liên hệ giữa S và U

$$ii) \quad S(t, t) = 1$$

$$iii) \quad S^+(t, t') = S(t', t)$$

$$iv) \quad S(t, t') = S(t, t'')S(t'', t')$$

v) S thỏa phương trình :

$$\frac{\partial}{\partial t} S(t, t') = \frac{\partial}{\partial t} U(t)U^+(t') = -\frac{i}{\hbar} W(t)U(t)U^+(t') = -\frac{i}{\hbar} W(t)S(t, t'), \quad (3.1.27)$$

vi) Và như vậy, tương tự toán tử tiến hóa, ta có thể biểu diễn S dưới dạng như sau :

$$S(t, t') = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 W(t_1) \right]. \quad (3.1.28)$$

Hệ thức Gell-Mann và Low. Trong phương trình xác định sự biến đổi theo thời gian của hàm sóng $|\psi_I(t)\rangle$ (3.1.14) cũng như trong các dẫn xuất ra toán tử tiến hóa và S

ma trận chúng ta đã đưa ra hàm sóng tại $t=0$ $|\psi_I(0)\rangle$. Chú ý rằng đây cũng chính là hàm sóng không phụ thuộc thời gian $|\psi_H\rangle$ trong biểu diễn Heisenberg và là hàm sóng tại $t=0$ $|\psi_S(0)\rangle$ trong biểu diễn Schrödinger; và vì vậy ta gọi chung là $|\psi(0)\rangle$. Ta cần phải tìm ra mối liên hệ nào đó giúp ta xác định $|\psi(0)\rangle$ vì nó như là điều kiện ban đầu để từ đó có thể xác định trạng thái tại những thời điểm khác.

Trong biểu diễn tương tác, toán tử Hamilton được tách ra làm hai phần W và H_0 . Trong đó phần không nhiễu loạn H_0 được chọn sao cho có thể xác định chính xác hệ hàm riêng và trị riêng của nó. Giả sử trạng thái cơ bản (đã biết) của H_0 là $|\phi_0\rangle$. Khi đó mối liên hệ giữa $|\phi_0\rangle$ và trạng thái chưa biết $|\psi(0)\rangle$ đã được Gell-Mann và Low khảo sát và chỉ ra :

$$|\psi(0)\rangle = S(0, -\infty) |\phi_0\rangle. \quad (3.1.29)$$

Để tìm hiểu hệ thức này, ta hãy dẫn ra $|\psi(0)\rangle$ từ định nghĩa S ma trận : tác động $S(0, t)$ lên phương trình $|\psi(t)\rangle = S(t, 0) |\psi(0)\rangle$ và sử dụng tính chất iv) và ii) của S ma trận, ta được :

$$|\psi(0)\rangle = S(0, t) |\psi(t)\rangle.$$

Lấy giới hạn $t \rightarrow -\infty$ cho

$$|\psi(0)\rangle = S(0, -\infty) |\psi(-\infty)\rangle. \quad (3.1.30)$$

So sánh (3.1.30) với (3.1.29) ta có $|\psi(-\infty)\rangle = |\phi_0\rangle$. Và ta diễn tả hệ thức Gell-Mann và Low dựa trên gần đúng đoạn nhiệt như sau: Ở quá khứ rất xa, lúc không có tương tác hệ ở trạng thái $|\psi(-\infty)\rangle = |\phi_0\rangle$. Khi thời gian tăng dần từ $-\infty$, thế tương tác W được bật mở và được đưa dần dần vào hệ cho đến khi $t=0$ thì tương tác được đưa vào hoàn toàn với hàm sóng tương ứng là $|\psi(0)\rangle$. Nói cách khác toán tử $S(0, -\infty)$ đã chuyển một cách đoạn nhiệt hàm sóng $|\psi(-\infty)\rangle = |\phi_0\rangle$ đến thời điểm $t=0$ tại đó thế tương tác W hiện diện hoàn toàn, và như vậy hàm sóng tương ứng $|\psi(0)\rangle$ tại $t=0$ chính là hàm riêng của Hamilton toàn phần H .

Hãy xét thêm trường hợp hệ tiến về tương lai xa, $t \rightarrow +\infty$: thế tương tác sẽ được tắt đi một cách đoạn nhiệt và tại $+\infty$ không còn tương tác, hệ sẽ trở về trạng thái cơ bản $|\psi(\infty)\rangle$, (giả thiết rằng) có liên hệ với trạng thái cơ bản $|\phi_0\rangle$ bằng một thừa số pha :

$$|\psi(\infty)\rangle = e^{i\alpha} |\phi_0\rangle.$$

Như vậy ta có :

$$e^{i\alpha} |\phi_0\rangle = |\psi(\infty)\rangle = S(\infty, 0) |\psi(0)\rangle = S(\infty, -\infty) |\psi(-\infty)\rangle = S(\infty, -\infty) |\phi_0\rangle \quad (3.1.31)$$

và

$$e^{i\alpha} = \langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle \quad (3.1.32)$$

3.3 Hàm Green :

Trong phần này chúng ta sẽ giới thiệu HG trong vật lý lượng tử và như đã nói, chúng ta giới hạn ở trường hợp nhiệt độ 0.

3.3.1 Định nghĩa Hàm Green fermion:

Chúng ta bắt đầu với định nghĩa HG electron :

$$G_{\nu}(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \langle | T a_{\nu}(t) a_{\nu}^+(t') | \rangle . \quad (3.1.33)$$

Ở đây ν là số lượng tử và thường bao gồm vector sóng \vec{k} và spin σ : $\nu = (\vec{k}, \sigma)$. $| \rangle$ là trạng thái của hệ và ở nhiệt độ 0 trạng thái này phải là trạng thái cơ bản; nếu Hamilton của hệ là H thì $| \rangle$ là trạng thái riêng của H . Các toán tử phụ thuộc thời gian $a(t), a^+(t)$ ở trong biểu diễn Heisenberg và tiến hóa theo qui luật :

$$\begin{aligned} a_{\nu}(t) &= e^{iHt/\hbar} a_{\nu} e^{-iHt/\hbar} \\ a_{\nu}^+(t) &= e^{iHt/\hbar} a_{\nu}^+ e^{-iHt/\hbar} \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

với $a_{\nu} \equiv a_{\nu}(t=0), a_{\nu}^+ \equiv a_{\nu}^+(t=0)$ mô tả trạng thái của H_0 . T là toán tử thời trình: đặt toán tử có biến thời gian sớm hơn về bên phải (hoặc dễ dễ nhớ : **tr**ẽ sang **tr**ái) và chú ý đối với toán tử fermion cần thêm dấu trừ cho mỗi lần hoán vị; như vậy ta có thể viết lại định nghĩa HG như sau :

$$G_{\nu}(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \langle | a_{\nu}(t) a_{\nu}^+(t') | \rangle \text{ nếu } t > t', \quad (3.1.35)$$

$$G_{\nu}(t, t') = +\frac{i}{\hbar} \langle | a_{\nu}^+(t') a_{\nu}(t) | \rangle \text{ nếu } t' > t, \quad (3.1.36)$$

hoặc

$$G_{\nu}(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle | a_{\nu}(t) a_{\nu}^+(t') | \rangle + \frac{i}{\hbar} \theta(t'-t) \langle | a_{\nu}^+(t') a_{\nu}(t) | \rangle , \quad (3.1.37)$$

với hàm θ là hàm bước nhảy.

Ý nghĩa của HG : từ định nghĩa (3.1.35) ($t > t'$) ta thấy HG mô tả qua 1 trình trong đó một hạt được tạo ra tại t' rồi truyền đến t và bị hủy. Trong trường hợp $t' > t$, (3.1.36), HG mô tả quá trình hủy một hạt (tức là tạo 1 lỗ trống) tại t sau đó hạt lại được tạo ra (lỗ trống bị hủy) tại t' . Như vậy HG mô tả quá trình truyền hạt (lỗ trống) và vì thế thường gọi là hàm truyền.

Sử dụng (3.1.34) ta có

$$\begin{aligned} G_\nu(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \langle | e^{\frac{i}{\hbar} H t} a_\nu e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{\frac{i}{\hbar} H t'} a_\nu^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} | \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \langle | a_\nu e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t')} a_\nu^+ | \rangle \end{aligned} \quad (3.1.38)$$

trong đó đã giả sử E trị riêng ứng với trạng thái cơ bản của hệ với Hamilton H : $H | \rangle = E | \rangle$. Biểu thức (3.1.38) cho thấy HG phụ thuộc vào $t-t'$. Tương tự ta cũng có tính chất này đối với trường hợp $t' > t$.

Ngoài HG (nhân quả hay còn gọi HG theo trật tự thời gian) vừa định nghĩa trên, người ta cũng đưa ra các HG trễ, sớm, nhỏ và lớn như sau :

$$\begin{aligned} G_\nu^r(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle | [a_\nu(t), a_\nu^+(t')]_- | \rangle \\ G_\nu^a(t, t') &= \frac{i}{\hbar} \theta(t'-t) \langle | [a_\nu(t), a_\nu^+(t')]_- | \rangle \\ G_\nu^<(t, t') &= \frac{i}{\hbar} \langle | a_\nu^+(t') a_\nu(t) | \rangle \\ G_\nu^>(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \langle | a_\nu(t) a_\nu^+(t') | \rangle \end{aligned} \quad (3.1.39)$$

Thực ra khi xét hệ cân bằng, về nguyên tắc, ta chỉ cần một HG, ví dụ HG nhân quả (3.1.37), vì tất cả các HG (3.1.39) có thể biểu diễn qua nó. Tuy nhiên tùy trường hợp mà mỗi HG có ưu điểm riêng và vì thế đôi khi người ta vẫn sử dụng chúng :

- i) $G_\nu^{r;a}(t, t')$ có cấu trúc giải tích tốt, chứa thông tin về tính chất phổ, mật độ trạng thái,....
- ii) $G_\nu^{<>}(t, t')$ có mối liên hệ trực tiếp với những tính chất động học như mật độ hạt/hàm phân bố, dòng.

Đặc biệt, nếu xét hệ không cân bằng thì tất cả các HG trên đều quan trọng và không thể bỏ qua.

Người ta cũng thường sử dụng định nghĩa HG nhiệt độ 0 như sau[‡] :

$$G_{\mu\nu}(x, t; x' t') = -\frac{i}{\hbar} \frac{\langle \Psi_0 | T \psi_\mu(x, t) \psi_\nu^+(x', t') | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (3.1.40)$$

[‡] Không ít sinh viên gặp lúng túng trong tham khảo tài liệu khi gặp các định nghĩa “khác nhau” của HG. Định nghĩa HG này được giới thiệu cũng nhằm giúp sinh viên làm quen với những tiếp cận khác nhau.

trong đó μ, ν là số lượng tử spin ; trong trường hợp hệ không định hướng từ và không ở trong từ trường thì $\mu = \nu$. $|\Psi_0\rangle$ là trạng thái cơ bản của hệ bao gồm tương tác. Ta xét hệ đồng nhất, khi đó HG phụ thuộc chỉ vào hiệu các biến $x-x', t-t'$. ψ, ψ^+ là những toán tử trường (trong biểu diễn Heisenberg), chúng có thể triển khai chuyển sang toán tử sinh hủy a, a^+ :

$$\begin{aligned}\psi_\mu(x, t) &= \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}\mu}(x) a_{\vec{k}\mu}(t) \\ \psi_\mu^+(x, t) &= \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}\mu}^*(x) a_{\vec{k}\mu}^+(t)\end{aligned}\quad (3.1.41)$$

với φ là hàm sóng (một hạt), trong gần đúng đơn giản nhất là sóng phẳng:

$$\varphi_{\vec{k}\mu}(x) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{\sqrt{V}} \sigma_\mu, \quad (3.1.42)$$

σ_μ là chỉ số spin. Khai triển (3.1.41) chính là phép biến đổi Fourier chuyển từ không gian \vec{x} sang không gian \vec{k} . Giả sử trạng thái cơ bản chuẩn hóa, tức là $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1$, khi đó HG trong không gian Fourier \vec{k}

$$G_{\vec{k}\mu}(t-t') = \int d\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} G_\mu(\vec{x}-\vec{x}', t-t') \quad (3.1.43)$$

tương đương với HG trong (3.1.33). Phép biến đổi ngược lại là

$$G_\mu(\vec{x}-\vec{x}', t-t') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} G_{\vec{k}\mu}(t-t') \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} G_{\vec{k}\mu}(t-t') \quad (3.1.44)$$

Người ta cũng thường dùng HG phụ thuộc tần số qua phép biến đổi Fourier theo thời gian

$$G_{\vec{k}\mu}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} G_{\vec{k}\mu}(t-t') \quad (3.1.45)$$

và ngược lại

$$G_{\vec{k}\mu}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_{\vec{k}\mu}(\omega). \quad (3.1.46)$$

Với toán tử thời trình T ta có thể viết lại (3.1.40) như sau

$$\begin{aligned}G_{\mu\nu}(x, t; x', t') &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \frac{\langle\Psi_0|\psi_\mu(x, t)\psi_\nu^+(x', t')|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} \\ &+ \frac{i}{\hbar} \theta(t'-t) \frac{\langle\Psi_0|\psi_\nu^+(x', t')\psi_\mu(x, t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}\end{aligned}\quad (3.1.47)$$

HG trong biểu diễn tương tác. HG trong biểu diễn Heisenberg không thích hợp cho lý thuyết nhiễu loạn. Ta sẽ chuyển HG sang biểu diễn tương tác. Áp dụng phép biến đổi theo thời gian (3.1.13) cho các toán tử a_ν và a_ν^+ trong (3.1.34) ta được

$$\begin{aligned} a_\nu(t) &= e^{\frac{iHt}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}} \hat{a}_\nu(t) e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \\ a_\nu^+(t) &= e^{\frac{iHt}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}} \hat{a}_\nu^+(t) e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \end{aligned} \quad (3.1.48)$$

Với \hat{a} là toán tử trong biểu diễn tương tác. Sử dụng định nghĩa toán tử tiến hóa

(3.1.16) $U(t) = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ và tính chất i) của S ma trận $S(t, t') = U(t)U^+(t')$ cho kết quả

$$\begin{aligned} a_\nu(t) &= U^+(t) \hat{a}_\nu(t) U(t) = S(0, t) \hat{a}_\nu(t) S(t, 0) \\ a_\nu^+(t) &= U^+(t) \hat{a}_\nu^+(t) U(t) = S(0, t) \hat{a}_\nu^+(t) S(t, 0) \end{aligned} \quad (3.1.49)$$

Gọi $|\phi_0\rangle$ là trạng thái cơ bản của Hamilton không nhiễu loạn H_0 , khi đó trạng thái cơ bản của Hamilton toàn phần H cho bởi (3.1.29)

$$| \rangle = S(0, -\infty) |\phi_0\rangle.$$

Thay kết quả này và (3.1.49) vào (3.1.37) ta được :

$$\begin{aligned} G_\nu(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle \phi_0 | S(-\infty, 0) S(0, t) \hat{a}_\nu(t) S(t, 0) \\ &\quad S(0, t') \hat{a}_\nu^+(t') S(t', 0) S(0, -\infty) | \phi_0 \rangle \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \theta(t'-t) \langle \phi_0 | S(-\infty, 0) S(0, t') \hat{a}_\nu^+(t') S(t', 0) \\ &\quad S(0, t) \hat{a}_\nu(t) S(t, 0) S(0, -\infty) | \phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.1.50)$$

Vì $S(0, -\infty) |\phi_0\rangle = S(0, \infty) |\phi_0\rangle e^{i\alpha}$ và với (3.1.32) ta được

$$\langle \phi_0 | S(-\infty, 0) = e^{-i\alpha} \langle \phi_0 | S(\infty, 0) = \frac{\langle \phi_0 | S(\infty, 0)}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}.$$

Sử dụng đẳng thức này và các tính chất của S ma trận, HG (3.1.50) có dạng :

$$\begin{aligned} G_\nu(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle} \times \\ &[\theta(t-t') \langle \phi_0 | S(\infty, t) \hat{a}_\nu(t) S(t, t') \hat{a}_\nu^+(t') S(t', -\infty) | \phi_0 \rangle \\ &\quad - \theta(t'-t) \langle \phi_0 | S(\infty, t') \hat{a}_\nu^+(t') S(t', t) \hat{a}_\nu(t) S(t, -\infty) | \phi_0 \rangle] \end{aligned} \quad (3.1.51)$$

Sử dụng toán tử thời trình T cho phần trong [...], ví dụ số hạng đầu, ta có

$$\begin{aligned} &\theta(t-t') \langle \phi_0 | S(\infty, t) \hat{a}_\nu(t) S(t, t') \hat{a}_\nu^+(t') S(t', -\infty) | \phi_0 \rangle \\ &= \theta(t-t') \langle \phi_0 | T \hat{a}_\nu(t) \hat{a}_\nu^+(t') S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle \end{aligned}$$

Thật vậy, toán tử $S(\infty, -\infty)$ gồm ba toán tử tác động trên ba khoảng thời gian (∞, t) , (t, t') và $(t', -\infty)$. Toán tử thời trình T sẽ tự động sắp xếp chúng theo đúng trình tự cần thiết: đi từ trái (trễ: t) sang phải (sớm: t') thì $S(\infty, t)$ bên trái $\hat{a}(t)$, rồi đến $S(t, t')$, kế đó là $\hat{a}^+(t)$ và sau cùng là $S(t', -\infty)$. Như vậy ta có được dạng đơn giản của HG trong biểu diễn tương tác:

$$G_v(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \frac{\langle \phi_0 | T \hat{a}_v(t) \hat{a}_v^+(t') S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (3.1.52)$$

Xét trường hợp đặc biệt không có tương tác, $W=0$, và vì thế $S=I$. Khi đó HG có dạng

$$G_{0,v}(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \langle \phi_0 | T \hat{a}_v(t) \hat{a}_v^+(t') | \phi_0 \rangle. \quad (3.1.53)$$

HG này mô tả hạt không tương tác và thường được gọi là HG tự do hay HG không nhiễu loạn. Nó có vai trò quan trọng vì qua nó ta có thể tính các HG có tương tác như sẽ thấy trong phần khai triển nhiễu loạn của HG.

3.3.2 Phương trình chuyển động của HG:

Bây giờ ta lấy đạo hàm HG theo thời gian t để dẫn ra phương trình chuyển động của HG. Chúng ta chọn HG được định nghĩa trong không gian x (3.1.47) vì muốn có sự so sánh với phương trình HG trong bài toán phương trình vi phân không đồng nhất. Với $\partial\theta(t-t')/\partial t = \delta(t-t')$ và $\partial\theta(t'-t)/\partial t = -\delta(t-t')$ và giả sử trạng thái cơ bản $|\Psi_0\rangle$ chuẩn hóa cũng như tạm bỏ qua các chỉ số spin ta có

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x, t; x', t') &= \delta(t-t') \langle \Psi_0 | [\psi(x, t), \psi^+(x', t)] | \Psi_0 \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | T i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \psi^+(x', t) | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.1.54)$$

Trong (3.1.54) ta đã dùng toán tử T để gộp các số hạng cho gọn. Sử dụng hệ thức phản giao hoán

$$[\psi(x, t), \psi^+(x', t)] = \delta(x-x')$$

cho ta

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x, t; x', t') = \delta(t-t') \delta(x-x') - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | T i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \psi^+(x', t) | \Psi_0 \rangle. \quad (3.1.55)$$

Chỉ với số hạng đầu bên vế phải ta có được phương trình HG tương ứng với phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất đã khảo sát trong chương trước. Nhưng

nhìn chung số hạng thứ hai trong vế phải khác 0 và cũng thường phức tạp ; vì vậy nói chung HG trong vật lý lượng tử không có ý nghĩa toán học như HG trong phương trình vi phân tuyến tính.

Ta hãy xét trường hợp (đặc biệt) hạt tự do. Phương trình chuyển động của hàm sóng cho bởi phương trình Heisenberg :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = [\psi(x,t), H] = -\frac{\hbar^2 \nabla_x^2}{2m} \psi(x,t). \quad (3.1.56)$$

Thay vào phương trình (3.1.55) ta được phương trình chuyển động cho HG tự do G_0 :

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right] G_0(x,t; x',t') = \delta(t-t') \delta(x-x'). \quad (3.1.57)$$

Như vậy phương trình vi phân cho HG hạt tự do là phương trình Schrödinger không đồng nhất, thuộc lớp phương trình vi phân tuyến tính không đồng nhất phụ thuộc thời gian (qua đạo hàm bậc I) chúng ta đã bàn tới trong chương 2.

3.3.3 Mối liên hệ giữa HG và một số đại lượng vật lý :

Câu hỏi thường được đặt ra : những HG “trừu tượng” trên có vai trò như thế nào đối với các đại lượng có thể đo lường (trong thực nghiệm) ? Dưới đây ta sẽ chỉ ra một số tương quan điển hình giữa HG và các đại lượng có thể khảo sát trong thực nghiệm.

Mật độ hạt được cho bởi $\langle n(x) \rangle = \langle \psi^+(x) \psi(x) \rangle$. Ta thấy ngay đại lượng này có liên hệ trực tiếp với HG (xem (3.1.40)):

$$\langle n(x) \rangle = -i\hbar G(x,t; x, t^+) \quad (3.1.58)$$

trong đó $t^+ = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} (t + \delta)$ để bảo đảm theo đúng trật tự thời gian.

Giá trị kỳ vọng (expectation value) của **động năng T** và **năng lượng toàn phần E** được xác định như sau [Fetter và Walecka (1971)] :

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int dx \left\langle -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right\rangle = \int dx \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(x,t) \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(x,t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\ &= -i\hbar \int dx \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{x' \rightarrow x} \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} G(x,t; x',t') \end{aligned} \quad (3.1.59)$$

$$E = \langle H \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \int dx \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{x' \rightarrow x} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right] G(x,t; x',t') ; \quad (3.1.60)$$

chuyển sang không gian Fourier với (3.1.44) và (3.1.46)

$$\begin{aligned}
\langle T \rangle &= -i\hbar \frac{1}{(2\pi)^4} \int dx \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{x' \rightarrow x} \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \int d\vec{k} d\omega e^{-i\omega(t-t')} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} G_{\vec{k}}(\omega) \\
&= -i\hbar \frac{V}{(2\pi)^4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int d\vec{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\xi} G_{\vec{k}}(\omega) ,
\end{aligned} \tag{3.1.61}$$

$$\begin{aligned}
E &= -i\hbar \frac{1}{(2\pi)^4} \int dx \lim_{t' \rightarrow t^+} \lim_{x' \rightarrow x} \int d\vec{k} d\omega \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right] e^{-i\omega(t-t')} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} G_{\vec{k}}(\omega) \\
&= -i\hbar \frac{V}{(2\pi)^4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int d\vec{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] e^{-i\omega\xi} G_{\vec{k}}(\omega) .
\end{aligned} \tag{3.1.62}$$

Ngoài ra người ta cũng có thể tính mật độ spin, mật độ dòng hạt,... qua HG.

Chương 4

Khai triển nhiễu loạn của hàm Green

HG trong biểu diễn tương tác (3.1.52) phụ thuộc vào S-ma trận $S(\infty, -\infty)$; ma trận này là chuỗi vô hạn của tương tác W:

$$\begin{aligned} S(\infty, -\infty) &= T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 W(t_1) \right] \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_n T[W(t_1) \dots W(t_n)] \end{aligned} \quad (3.1.63)$$

Như vậy HG cũng là một chuỗi vô hạn của những số hạng phụ thuộc vào thế tương tác.

4.1 Khai triển nhiễu loạn và định lý Wick

Để khảo sát HG, trước hết ta viết tử số của HG dưới dạng chuỗi này, khi đó:

$$\begin{aligned} G_v(t-t') &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\langle | T \hat{a}_v(t) \hat{a}_v^+(t') S(\infty, -\infty) | \rangle}{\langle | S(\infty, -\infty) | \rangle} \\ &= \frac{1}{\langle | S(\infty, -\infty) | \rangle} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_n \langle | T[W(t_1) \dots W(t_n) \hat{a}_v(t) \hat{a}_v^+(t')] | \rangle \end{aligned} \quad (3.1.64)$$

Như vậy ta có một phép đồ nhiễu loạn cho HG.

Chúng ta hãy xét riêng phần tử số của HG. Phần tử cần quan tâm là

$$\langle | T[W(t_1) \dots W(t_n) \hat{a}_v(t) \hat{a}_v^+(t')] | \rangle \quad (3.1.65)$$

có cấu trúc được xác định qua thế tương tác. Hãy xét hai tương tác điển hình là tương tác e-e (qua thế Coulomb) và tương tác e-phonon.

Tương tác hạt tích điện qua thế tương tác Coulomb có dạng:

$$W(t) = \frac{1}{2} \sum_{k, k', q} V_0(q) a_{k-q}^+(t) a_{k+q}^+(t) a_{k'}(t) a_k(t), \quad (3.1.66)$$

với $V_0(q) = \frac{4\pi e^2}{v \epsilon_0 q^2}$.

Tương tác e-phonon:

$$W(t) = \sum_{k, q} M_q a_{k+q}^+(t) a_k(t) [b_q(t) + b_{-q}^+(t)] = \sum_{k, q} M_q a_{k+q}^+(t) a_k(t) B_q(t) \quad (3.1.67)$$

Mỗi loại tương tác chứa 3 hay 4 toán tử trường, trong đó số toán tử trường fermion là chẵn và số toán tử sinh bằng số toán tử hủy. Vì vậy ta cần đánh giá những số hạng kiểu như

$$\langle | T[a_k(t)a_{k_1}^+(t_1)a_{k_2}(t_2)a_{k_3}^+(t_3)] | \rangle, \quad (3.1.68)$$

và các số hạng tương tự bậc cao hơn.

Để làm việc này người ta dùng **định lý Wick**: Biểu thức (3.1.68) (trung bình T-tích (tức toán tử thời trình)) là tổng các bất cặp khả dĩ.

Chú ý rằng:

- i) những bất cặp của toán tử sinh với sinh hoặc hủy với hủy không có đóng góp: $\langle | T[a_\mu(t)a_\nu(t_2)] | \rangle = \langle | T[a_\mu^+(t)a_\nu^+(t_2)] | \rangle = 0$, dù μ bằng hoặc khác ν .
- ii) và do vậy chỉ còn những cặp giữa 1 toán tử sinh và một toán tử hủy kiểu như $\langle | T[a_k(t)a_{k_2}^+(t_2)] | \rangle$; chúng sẽ chỉ khác không khi $k = k_2$, tức là:
$$\langle | T[a_k(t)a_{k_2}^+(t_2)] | \rangle = \delta_{k,k_2} \langle | T[a_k(t)a_k^+(t_2)] | \rangle.$$
 Và như vậy nếu có n toán tử sinh và n toán tử hủy, ta có $n!$ cặp.
- iii) $\langle | A_k(t) | \rangle = 0$ và vì thế tất cả các T-tích có số lẻ các toán tử đều bằng không. Do đó, với tương tác e-phonon, trong chuỗi (3.1.64) chỉ những số hạng với n chẵn tồn tại, những số hạng với n lẻ triệt tiêu vì số toán tử trường của phonon là lẻ.

Ngoài ra, cần để ý một số nguyên tắc sau:

- a) Mỗi lần hoán vị toán tử fermion: nhân thêm (-1) \rightarrow nếu số lần hoán vị là lẻ thì thêm dấu trừ
- b) Khi xét T-tích của cặp giữa toán tử sinh và hủy $\langle | T[a_k(t)a_{k_2}^+(t_2)] | \rangle$
 - nếu hai toán tử cùng thời gian thì toán tử sinh được đặt bên trái:
$$\delta_{k,k_2} \langle | T[a_k^+(t)a_k(t)] | \rangle = \delta_{k,k_2} [-iG_k^0(t,t^+)] = \delta_{k,k_2} \langle n \rangle = \delta_{k,k_2} n_k$$
 - nếu khác thời gian thì toán tử sinh được đặt bên phải:
$$\delta_{k,k_2} \langle | T[a_k(t)a_{k_2}^+(t_2)] | \rangle = i\delta_{k,k_2} G_k^0(t-t_2)$$
- c) T-tích chứa các toán tử khác loại (ví dụ electron và phonon) và giao hoán nhau thì có thể tách thành các T-tích của mỗi loại:

$$\langle | T[a_k(t)B_{k_2}(t_2)a_{k_1}^+(t_1)B_{k_3}(t_3)] | \rangle = \langle | Ta_k(t)a_{k_1}^+(t_1) | \rangle \langle | TB_{k_2}(t_2)B_{k_3}(t_3) | \rangle$$

Với định lý Wick, ta hãy khảo sát HG trong trường hợp tương tác e-phonon. Số hạng với $n=1$ bằng không, như đã nói trên. Tử số của HG có dạng:

$$G_k^0(t-t') + \frac{(-i)^3}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \times \sum_{q_1 q_2} M_{q_1} M_{q_2} \underbrace{\langle |TB_{q_1}(t_1)B_{q_2}^+(t_2)| \rangle}_{(phonon)} \sum_{k_1 k_2} \underbrace{\langle |Ta_k(t)a_{k_1+q_1}^+(t_1)a_{k_1}(t_1)a_{k_2+q_2}^+(t_2)a_{k_2}(t_2)a_k^+(t')| \rangle}_{(electron)} \quad (3.1.69)$$

+...

Phần T-tích của toán tử phonon cho:

$$(phonon) \rightarrow -i \langle |TB_{q_1}(t_1)B_{q_2}^+(t_2)| \rangle = \delta_{q_1=-q_2} D_{q_1}^0(t_1-t_2) \quad (3.1.70)$$

Phần T-tích của các toán tử electron cho 6 tổ hợp của các T-tích của các cặp:

$$\begin{aligned} (electron) &= \langle |Ta_k(t)a_{k_1+q_1}^+(t_1)a_{k_1}(t_1)a_{k_2+q_2}^+(t_2)a_{k_2}(t_2)a_k^+(t')| \rangle \\ &= \langle |Ta_k(t)a_{k_1+q_1}^+(t_1)| \rangle \langle |Ta_{k_1}(t_1)a_{k_2+q_2}^+(t_2)| \rangle \langle |Ta_{k_2}(t_2)a_k^+(t')| \rangle \quad (1) \\ &+ \langle |Ta_k(t)a_{k_2+q_2}^+(t_2)| \rangle \langle |Ta_{k_2}(t_2)a_{k_1+q_1}^+(t_1)| \rangle \langle |Ta_{k_1}(t_1)a_k^+(t')| \rangle \quad (2) \\ &+ \langle |Ta_k(t)a_{k_1+q_1}^+(t_1)| \rangle \langle |Ta_{k_1}(t_1)a_k^+(t')| \rangle \langle |Ta_{k_2+q_2}^+(t_2)a_{k_2}(t_2)| \rangle \quad (3) \\ &+ \langle |Ta_k(t)a_k^+(t')| \rangle \langle |Ta_{k_1+q_1}^+(t_1)a_{k_1}(t_1)| \rangle \langle |Ta_{k_2+q_2}^+(t_2)a_{k_2}(t_2)| \rangle \quad (4) \\ &+ \langle |Ta_k(t)a_{k_2+q_2}^+(t_2)| \rangle \langle |Ta_{k_1+q_1}^+(t_1)a_{k_1}(t_1)| \rangle \langle |Ta_{k_2}(t_2)a_k^+(t')| \rangle \quad (5) \\ &+ \langle |Ta_k(t)a_k^+(t')| \rangle \langle |Ta_{k_1}(t_1)a_{k_2+q_2}^+(t_2)| \rangle \langle |Ta_{k_2}(t_2)a_{k_1+q_1}^+(t_1)| \rangle \quad (6) \end{aligned} \quad (3.1.71)$$

Hoặc chuyển đổi sang HG tự do và toán tử số hạt ta được:

$$\begin{aligned} &i^3 \delta_{k=k_1+q_1=k_2} G_k^0(t-t_1) G_{k-q_1}^0(t_1-t_2) G_k^0(t_2-t') \quad (1) \\ &+ i^3 \delta_{k=k_2-q_1=k_1} G_k^0(t-t_2) G_{k+q_1}^0(t_2-t_1) G_k^0(t_1-t') \quad (2) \\ &+ i^2 \delta_{q_1=0} \delta_{k=k_1} n_{k_2} G_k^0(t-t_1) G_k^0(t_1-t') \quad (3) \\ &+ i \delta_{q_1=0} \delta_{q_2=0} n_{k_1} n_{k_2} G_k^0(t-t') \quad (4) \\ &+ i^2 \delta_{q_1=0} \delta_{k=k_2} n_{k_1} G_k^0(t-t_2) G_k^0(t_2-t') \quad (5) \\ &- i^3 \delta_{k_2-q_1=k_1} G_k^0(t-t') G_{k_1}^0(t_1-t_2) G_{k_1+q_1}^0(t_2-t_1) \quad (6) \end{aligned} \quad (3.1.72)$$

4.2 Giải đồ Feynman

Phương pháp giải đồ trong khai triển chuỗi của HG đã được Feynman đề xuất và tỏ ra rất hữu ích – giúp ta có một cái nhìn cụ thể và trực quan về quá trình tương tác.

Phương pháp này theo quy tắc như sau:

- i. HG fermion $G_k^0(t-t')$ được biểu diễn bằng đường liền nét với mũi tên đi từ t' đến t
- ii. HG phonon (boson vô hướng) $D_q^0(t-t')$ được biểu thị bằng đường cách nét nối t' và t . HG boson vectơ được biểu thị bằng đường sóng nối t' và t .
- iii. Thế Coulomb được biểu diễn bằng đường sóng hoặc ziczac nối t' và t .
- iv. Mật độ n được biểu thị bằng vòng kín bắt đầu và kết thúc tại cùng một điểm
- v. Bảo toàn xung lượng tại mỗi đỉnh được thể hiện qua hàm δ

4.3 Phương trình Dyson

4.3.1 Kiến thức hỗ trợ:

- Hamiltonian cơ bản:

$$H = H_e + H_{ion} + H_{e-ion} + H_{ex} \quad (3.1.73)$$

$$H_e = H_e^0 + H_{e-e} \quad (3.1.74)$$

$$H_{ion} = H_{ion}^0 + H_{ion-ion} = H_{ion}^0 + H_{ion-ion}^0 + H_{ph} \quad (3.1.75)$$

$$H_{e-ion} = H_{e-ion}^0 + H_{e-ph} \quad (3.1.76)$$

Phần $H_{ion-ion}$ đã được tách thành 2 thành phần: $H_{ion-ion}^0$ mô tả tương tác khi các ion ở vị trí cân bằng; H_{ph} là phần hiệu chỉnh tính đến dao động mạng (phonon). Cũng thế đối với H_{e-ion}

- Mô hình “jellium”: dành cho khí electron. Trong mô hình này người ta xét các ion như một nền điện tích dương không đổi. Khi đó tất cả các tương tác liên quan đến mạng ion được biểu thị qua thế mạng ion U_L :

$$H = H_e^0 + W + U_L + H_{ex} \quad (3.1.77)$$

- Hamilton khí electron

$$H(t) = \int dx_1 \psi^\dagger(x_1, t) h(x_1, t) \psi(x_1, t) + \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \psi^\dagger(x_1, t) \psi^\dagger(x_2, t) V(x_1 - x_2) \psi(x_2, t) \psi(x_1, t) \quad (3.1.78)$$

ở đây

$$h(x_1, t) = H_e^0(x_1) + H_{ex}(x_1, t) + U_L(x_1, t) = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + H_{ex}(x_1, t) + U_L(x_1, t) \quad (3.1.79)$$

và $V(x_1 - x_2)$ là thế Coulomb.

4.3.2 “Phương trình Dyson” trường hợp nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian: (tham khảo, ví dụ HG của Nguyễn Văn Liễn trang 93-95, hoặc Green’s Functions in quantum Physics của Economou, trang 55-56)

Xét trường hợp Hamiltonian $H = H_0 + W$ không phụ thuộc thời gian, ta có được:

$$G = G_0 + G_0 W G \\ = G_0 + G W G_0 \quad (3.1.80)$$

Đây được xem như phương trình Dyson cho HG.

Trong r-biểu diễn:

$$G(r, r', \lambda) = G_0(r, r', \lambda) + \int dr_1 dr_2 G_0(r, r_1, \lambda) W(r_1, r_2) G(r_2, r', \lambda) \quad (3.1.81)$$

và trong k-biểu diễn:

$$G(k, k', \lambda) = G_0(k, k', \lambda) + \sum G_0(k, k_1, \lambda) W(k_1, k_2) G(k_2, k', \lambda) \quad (3.1.82)$$

4.3.3 Phương trình Dyson trường hợp nhiễu loạn phụ thuộc thời gian:

- Phương trình chuyển động của HG (3.1.55):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x, t; x', t') = \delta(t - t') \delta(x - x') - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | T i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \psi^+(x', t') | \Psi_0 \rangle. \quad (3.1.83)$$

với

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = [\psi(x, t), H(t)]. \quad (3.1.84)$$

Sử dụng Hamiltonian (3.1.78) ta được:

$$[\psi(x, t), H(t)] = h\psi(x, t) + \int dx_2 V(x - x_2) \psi^+(x_2, t) \psi(x_2, t) \psi(x, t). \quad (3.1.85)$$

Do vậy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G(x_1, t_1; x'_1, t'_1) = \delta(t_1 - t'_1) \delta(x_1 - x'_1) + hG(x_1, t_1; x'_1, t'_1) - \frac{i}{\hbar} \int dx_2 V(x_1 - x_2) \langle \Psi_0 | T \psi^+(x_2, t_1^+) \psi(x_2, t_1) \psi(x_1, t_1) \psi^+(x'_1, t'_1) | \Psi_0 \rangle \quad (3.1.86)$$

$t_1^+ = t_1$ là để bảo đảm trật tự trong (3.1.85). Ta có thể viết gọn lại với việc đặt $1 = (x_1 t_1) \dots$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G(1, 1') = \delta(1 - 1') + hG(1, 1') - \frac{i}{\hbar} \int d2 V(1 - 2) \langle \Psi_0 | T \psi^+(2^+) \psi(2) \psi(1) \psi^+(1') | \Psi_0 \rangle_{t_2=t_1} \quad (3.1.87)$$

ở đây ta đã đặt $t_2^+ = t_2$ và $V(1 - 2) = V(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2)$; $d2 = dx_2 dt_2$.

Hoặc:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) G(1, 1') = \delta(1 - 1') + (H_{ex} + U_L) G(1, 1') - \frac{i}{\hbar} \int d2 V(1 - 2) \langle \Psi_0 | T \psi^+(2^+) \psi(2) \psi(1) \psi^+(1') | \Psi_0 \rangle_{t_2=t_1} \quad (3.1.88)$$

Nếu hệ electron cô lập (không tương tác) thì ta có ngay phương trình cho HG tự do:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) G^0(1, 1') = \delta(1 - 1') \quad (3.1.89)$$

(HG đảo:

$$G^0(1,1')^{-1} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) \delta(1-1') \quad (3.1.90)$$

với

$$\int d2 G_0(12)G_0(21')^{-1} = \delta(1-1') \quad (3.1.91)$$

)

• **HG hai hạt**

Đối với hệ tương tác, HG $G(1,1')$ phụ thuộc vào thành phần gồm 4 toán tử trường. Hệ 4 toán tử này tương ứng HG hai hạt G_2 được định nghĩa như sau:

$$G_2(121'2') = \frac{1}{(i\hbar)^2} \langle | T \psi(1)\psi(2)\psi^+(2')\psi^+(1') | \rangle \quad (3.1.92)$$

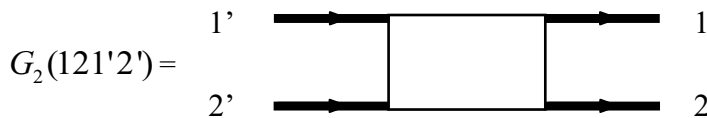
PT cho HG có thể được viết lại:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) G(1,1') = \delta(1-1') + (H_{ex} + U_L)G(1,1') - i\hbar \int d2V(1-2)G_2(121'2')_{t_2=t_1} \quad (3.1.93)$$

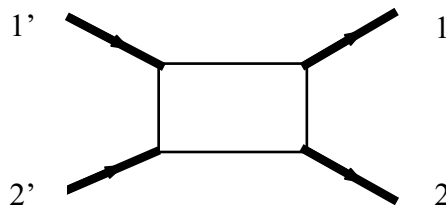
Như vậy trong trường hợp có tương tác, phương trình cho HG một hạt không phải là phương trình đóng! Và vì sự tương tác, để tìm HG 1 hạt, ta phải biết HG 2 hạt và cứ thế ta phải biết HG n hạt.

Một số nét về HG G_2

- HG G_2 mô tả quá trình truyền của hai hạt được thêm (sinh) vào hệ tại $1'$ và $2'$ và xuất hiện (hoặc được dời (hủy) khỏi hệ) tại 1 và 2 . Nói chung chuyển động của các hạt có tương quan với nhau vì các hạt tương tác với nhau. Giản đồ cho HG G_2 :



Chú ý: thỉnh thoảng người ta dùng giản đồ trên để minh họa cho trường hợp $t_1 = t_2, t'_1 = t'_2$; và giản đồ cho G_2 trong trường hợp tổng quát là



HG G_2 dùng để mô tả hệ hai hạt tương tác với nhau, ví dụ exciton- hạt được tạo thành do sự bắt cặp giữa electron và lỗ trống qua tương tác Coulomb.

- Gần đúng cho HG G_2
 - Ở gần đúng bậc nhất ta có thể bỏ qua tương quan của các hạt và xem rằng các hạt truyền qua môi trường hoàn toàn độc lập với nhau:

$$\begin{aligned}
G_2(121'2') &= \text{Diagram: two horizontal lines (1' and 2') with a vertical line connecting them, and another vertical line connecting them further to the right.} \\
&= \text{Diagram: two parallel horizontal lines (1' and 2') with arrows pointing right.} \quad \pm \quad \text{Diagram: two crossing lines (1' and 2') with arrows pointing right.} \\
&= G(11')G(22') \pm G(12')G(21') \tag{3.1.94}
\end{aligned}$$

(dấu + dành cho boson, dấu trừ dành cho fermion)

Gần đúng này chính là gần đúng Hartree-Fock (HF). Số hạng thứ nhất tương ứng gần đúng Hartree, số hạng thứ hai tương ứng gần đúng Fock. Trong (3.1.94) đã xét đến tính đồng nhất của các hạt: vì các hạt đồng nhất nên ta không thể phân biệt các quá trình i) hạt được thêm ở 1' và xuất hiện ở 1 với các quá trình ii) hạt được thêm ở 1' và xuất hiện ở 2. [Gần đúng HF thuộc về loại gần đúng trường trung bình (mean field)]

- Gần đúng bậc cao hơn: Gần đúng thang (ladder approximation; đôi khi còn gọi là gần đúng Bethe-Salpeter mặc dù gần đúng BS này tổng quát hơn gần đúng thang)

$$\begin{aligned}
G_2(121'2') &= \text{Diagram: two horizontal lines (1' and 2') with a vertical line connecting them, and another vertical line connecting them further to the right.} \\
&= \text{Diagram: two parallel horizontal lines (1' and 2') with arrows pointing right.} \quad \pm \quad \text{Diagram: two crossing lines (1' and 2') with arrows pointing right.} \quad + \quad \text{Diagram: two horizontal lines (1 and 2) with a vertical line connecting them, and another vertical line connecting them further to the right, with a dashed line connecting the two vertical lines.} \\
&= G(11')G(22') \pm G(12')G(21') + i\hbar \int d4 d5 G(14)G(25)W(45)G_2(451'2') \tag{3.1.95}
\end{aligned}$$

Nếu ta thực hiện phép lặp để giải phương trình tích phân trên thì sẽ được chuỗi vô hạn các giản đồ thang (ladder diagram)

$$\begin{aligned}
G_2(121'2') &= \text{Diagram: two parallel horizontal lines (1' and 2') with arrows pointing right.} \quad + \quad \text{Diagram: two horizontal lines (1' and 2') with a vertical line connecting them, and another vertical line connecting them further to the right, with a dashed line connecting the two vertical lines.} \quad + \quad \text{Diagram: two horizontal lines (1' and 2') with a vertical line connecting them, and another vertical line connecting them further to the right, with two dashed lines connecting the two vertical lines.} \quad + \dots \\
&\quad + \text{ số hạng trao đổi}
\end{aligned}$$

- HG trong gần đúng HF

Với gần đúng HF (3.1.94) phương trình chuyển động của HG (3.1.93) thành

$$\begin{aligned}
& \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) G(1,1') = \delta(1-1') + (H_{ex} + U_L)G(1,1') \\
& -i\hbar \int d2V(1-2) \left[\underbrace{G(11')G(22^+)}_{Hartree} - \underbrace{G(12')G(21')}_{Fock} \right] \\
& = \delta(1-1') + [H_{ex} + U_L - i\hbar \int d2V(1-2) \underbrace{G(22^+)}_{n(2)}] G(1,1') + i\hbar \int d2V(1-2)G(12')G(21')
\end{aligned} \tag{3.1.96}$$

Số hạng Hartree và U_L thường khử nhau. Ta có PT:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) G(1,1') = \delta(1-1') + H_{ex}G(1,1') + i\hbar \int d2V(1-2)G(12')G(21') \tag{3.1.97}$$

- Phương trình Dyson

Hệ PT (3.1.93) không kín; vì vậy ta tìm một hệ phương trình đóng một cách hình thức bằng việc đưa vào toán tử năng lượng riêng Σ được xác định như sau:

$$\begin{aligned}
& -i\hbar \int d3 V(1-3)G_2(131'3^+) \\
& = \int d2 \Sigma(12)G(21') - i\hbar \int d3 V(1-3)G(11')G(33^+)
\end{aligned} \tag{3.1.98}$$

Với định nghĩa này ta có phương trình Dyson cho HG:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) G(1,1') = \delta(1-1') + H_{ex}G(1,1') + \int d2 \Sigma(12)G(21') \tag{3.1.99}$$

(Ta đã xem số hạng Hartree và U_L khử nhau.) Dạng thức cụ thể của năng lượng riêng sẽ được thảo luận sau. Với HG đảo (3.1.90) có thể chuyển PT Dyson sang dạng PT tích phân

$$G(1,1') = G^0(1,1') + \int d2G^0(1,2)H_{ex}G(2,1') + \int d2 d3 G^0(1,2)\Sigma(23)G(31') \tag{3.1.100}$$

Hoặc ở dạng gọn hơn:

$$G(1,1') = G^0(1,1') + \int d2 d3 G^0(1,2)\Sigma'(23)G(31') \tag{3.1.101}$$

với

$$\sigma(12) = \Sigma^\delta(12) + \Sigma(12) = H_{ex}\delta(1-2) + \Sigma(12) \tag{3.1.102}$$

- Năng lượng riêng Σ :
Người ta dẫn ra được rằng:

$$\Sigma(12) = -i\hbar \int d4d5 W(51)G(14)\Gamma(425) \tag{3.1.103}$$

Trong đó Γ được gọi là hàm đỉnh và được cho bởi

$$\Gamma(123) = -\delta(1-2)\delta(1-3) + \int d4d5d6d7 \frac{\partial \Sigma(12)}{\partial G(45)} G(46)\Gamma(673)G(75), \quad (3.1.104)$$

W là thế tương tác chắn

$$W(12) = V(1-2) + \int d3d4V(2-3)L(34)W(41) \quad (3.1.105)$$

với L gọi là hàm phân cực và có dạng

$$L(12) = i\hbar \int d3d4G(13)\Gamma(342)G(41^+) \quad (3.1.106)$$

Các PT (3.1.100) - (3.1.106) tạo thành một hệ PT kín. Để giải hệ này người ta phải thực hiện những gần đúng khác nhau, tùy cảnh huống cho phép.

- Gần đúng HF chắn (SHFA):
Chỉ giữ lại số hạng đầu của hàm đỉnh:

$$\Gamma(123) = -\delta(1-2)\delta(1-3) \quad (3.1.107)$$

và gần đúng này gọi là “bỏ qua hiệu chỉnh đỉnh”. Có khi còn gọi là gần đúng HF chắn (SHF- screened HF). Với gần đúng này ta có được

$$\Sigma(12) = i\hbar W(21)G(12), \quad (3.1.108)$$

$$W(12) = V(1-2) + \int d3d4V(2-3)L(34)W(41) \quad (3.1.109)$$

với

$$L(12) = -i\hbar G(12)G(21^+) \quad (3.1.110)$$

Gần đúng này cho hàm phân cực L tương đương với gần đúng RPA (Random Phase Approx.). Vì thế thỉnh thoảng thuật ngữ RPA và SHFA được dùng để chỉ cùng một gần đúng (trong khi RPA chỉ nhắm đến hàm phân cực L , còn SHFA thì dành cho cả năng lượng riêng và L).

Với hệ đồng nhất (chỉ phụ thuộc vào tọa độ tương đối $r-r' = \rho$ và $t-t' = \tau$) các PT trên có thể được viết trong không gian xung lượng; ví dụ PT (3.1.109) cho thế chắn trở thành:

$$W(q, \omega) = V(q) + V(q)L(q, \omega)W(q, \omega) \quad (3.1.111)$$

Hay

$$W(q, \omega) = \frac{V(q)}{1 - V(q)L(q, \omega)} \quad (3.1.112)$$

Khi xem xét thể chắn, người ta thường đưa vào khái niệm hàm điện môi (dielectric function) $\varepsilon(q, \omega)$ được định nghĩa như sau:

$$W(k, \omega) = V(q) / \varepsilon(q, \omega) \quad (3.1.113)$$

Từ (3.1.112) ta có

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - V(q)L(q, \omega) \quad (3.1.114)$$

Đối với khí electron, với định nghĩa của hàm phân cực, có thể “khá dễ dàng” tìm được:

$$L(q, \omega) = \sum_k \frac{n_{k-q} - n_k}{\hbar(\omega + i\delta + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k)} \quad (3.1.115)$$

Và

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - V(q) \sum_k \frac{n_{k-q} - n_k}{\hbar(\omega + i\delta + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k)} \quad (3.1.116)$$

Đây là công thức Lindhard cho hàm điện môi.

Xét khí electron 3 chiều, người ta ta có thể dẫn ra kết quả, khi lấy $\omega \rightarrow 0$,

$$\varepsilon(q, 0) = 1 + \frac{\kappa^2}{q^2} \quad (3.1.117)$$

với κ gọi là số sóng chắn

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0} \frac{\partial n}{\partial \mu}} \quad (3.1.118)$$

Như vậy

$$V_s(q) \equiv W(q, 0) = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0 L^3} \frac{1}{q^2 + \kappa^2} \quad (3.1.119)$$

Kết quả này cho thấy thể chắn đã khử đi sự phân kỳ của thế Coulomb tại $q \rightarrow 0$. Phép biến đổi Fourier của (3.1.119) cho

$$V_s(r) = \sum_q V_s(q) = \sum_q \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0 L^3} \frac{1}{q^2 + \kappa^2} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} e^{-\kappa r} \quad (3.1.120)$$

Đây là thế Yukawa !

▪ Gần đúng HF

Nếu bỏ qua phần chắn trong thể tương tác, tức là chỉ giữ lại số hạng đầu trong (3.1.109) thì năng lượng riêng có dạng đơn giản là

$$\Sigma(12) = i\hbar V(2-1)G(12), \quad (3.1.121)$$

thay vào (3.1.99) thì ta có lại PT HG trong gần đúng HF đã dẫn ra trong (3.1.97).

Không xét tương tác với trường ngoài và giả sử hệ đồng nhất, ta có thể viết PT Dyson trong không gian k như sau:

$$\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) G(k, \omega) = 1 + \Sigma(k, \omega) G(k, \omega) \quad (3.1.122)$$

Hay

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_k^0 - \Sigma(k, \omega)} \quad (3.1.123)$$

(chặt chẽ hơn, mẫu số phải có thêm $i\delta$ với $\delta \rightarrow 0$.) So với trường hợp hạt tự do, PT (3.1.123) cho thấy năng lượng hạt tự do đã được thay thế bằng $\varepsilon_k^0 + \Sigma(k, \omega)$ do hệ quả của tương tác. Σ rõ ràng là một hiệu chỉnh năng lượng và mang tính tự thân của hệ tương tác. Vì vậy người ta gọi là năng lượng riêng.