Удивительно, что весьма скудные средства позволяют выяснить много интересного о довольно сложных системах. Пользоваться преобразованием Фурье и контурными интегралами придётся часто, поэтому они – герои этой повести.

Однако ladies first:

ФОРМУЛА СОХОЦКОГО

При работе с функциями Грина случается вычислять выражения типа

$$\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)dx}{x+i\eta}$$

И сейчас докажем весьма полезную интегральную формулу – предельное соотношение Сохоцкого: если $f(x)$ *– достаточно хорошая функция (в частности, непрерывная при* $x=0$*), то справедливо равенство*

$$\boxed{\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x\pm i\eta}dx=\mp i\pi f(0)+v.p.\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x}dx}$$

Главное значение по Коши несобственного интеграла второго рода определяется так

$$v.p.\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x}dx=\lim_{\eta\to 0_+}\left[\int_{-\infty}^{-\eta}\frac{f(x)}{x}dx+\int_{+\eta}^{+\infty}\frac{f(x)}{x}dx\right]$$

Вам, наверняка, уже где-нибудь встречалась запись

$$\boxed{\lim_{\eta\to 0}\frac{1}{x\pm i\eta}=\mp i\pi\delta(x)+v.p.\frac{1}{x}}$$

Это и есть формула Сохоцкого: по сути, написано то, что и наверху (через строчку), только в этом случае подразумевается, что обе стороны равенства живут под интегралом, будучи умноженными на «хорошую» функцию от x.

Убедимся, что «всё так». Рассмотрим предел вида

$$\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x\pm i\eta}dx=\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\frac{x\mp i\eta}{x^2+\eta^2}dx=\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\frac{x}{x^2+\eta^2}dx\mp i\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\frac{\eta}{x^2+\eta^2}dx$$

$$\left.\begin{array}{l}\displaystyle\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{x^2+\eta^2}=0\quad\text{при}\quad x\neq 0\\ \displaystyle\int_{-b}^{b}\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{x^2+\eta^2}dx=\lim_{\eta\to 0}\arctan\left(\frac{x}{\eta}\right)\Bigg|_{-b}^{b}=\pi\Rightarrow\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{x^2+\eta^2}=\pi\delta(x)\end{array}\right\}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\mp i\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\frac{\eta}{x^2+\eta^2}dx=\mp i\pi f(0)$$

$$\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\frac{x}{x^2+\eta^2}dx=\lim_{\eta\to 0}\left[\int_{-\infty}^{-\eta}\frac{f(x)}{x^2+\eta^2}xdx+\int_{+\eta}^{+\infty}\frac{f(x)}{x^2+\eta^2}xdx\right]=$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\left[\int_{-\infty}^{-\eta}\frac{f(x)}{x}dx+\int_{+\eta}^{+\infty}\frac{f(x)}{x}dx\right]=v.p.\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x}dx$$

Собираем всё вместе и приходим в пункт назначения

$$\lim_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x\pm i\eta}dx=\mp i\pi f(0)+v.p.\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x}dx$$

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

Из теории интегралов Фурье известно, что

$$f(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\,F(k)\exp(ikx)$$

(при условии, что интеграл существует). Это утверждение можно доказать, представляя функцию $f(x)$ в виде комплексного ряда Фурье в интервале $-L...L$ и переходя к пределу при $L\to\infty$. Определяемая равенством функция

$$F(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,f(x)\exp(-ikx)$$

зовётся изображением функции $f(x)$ по Фурье. Найдём, к примеру, изображение дельта-«функции» по Фурье

$$\Delta(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\;\delta(x)\exp(-ikx)=1$$

Применяя обратное преобразование Фурье, получим интегральное представление дельта-«функции»

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\;\Delta(k)\exp(ikx)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\;\exp(ikx)$$

При этом, конечно необходимо помнить, что дельта-«функция», равно как и любое её представление, имеет подинтегральную прописку.

Обобщим на случай произвольного числа переменных:

$$F(k_1,...,k_D)=\int_{-\infty}^{+\infty}...\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1...dx_D\;f(x_1,...,x_D)\exp\left(-i\sum_{j=1,D}k_jx_j\right)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,f(x)\exp(-ik\cdot x)$$

$$f(x_1,...,x_D)=\frac{1}{(2\pi)^D}\int_{-\infty}^{+\infty}...\int_{-\infty}^{+\infty}dk_1...dk_D\;F(k_1,...,k_D)\exp\left(i\sum_{j=1,D}k_jx_j\right)=\frac{1}{(2\pi)^D}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\;F(k)\exp(ik\cdot x)$$

Если мы работаем в трёхмерном пространстве (т.е. $D=3$), то для изображения дельта-«функции» по Фурье и её представления через интеграл от экспоненты имеем

$$\Delta(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\;\delta(x)\exp(-ik\cdot x)=1$$

$$\delta(x)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\;\Delta(k)\exp(ik\cdot x)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\;\exp(ik\cdot x)$$

ЗАДАЧКИ «НА НАХОДЧИВОСТЬ»

Как показать, что

$$\nabla^2 \frac{1}{|x|} = -4\pi\delta(x) \quad ?$$

Оказывается, что мы уже это показали, когда искали функцию Грина, удовлетворяющую дифуру (см. СЕМИНАР 1)

$$\left(-\frac{1}{2m}\nabla^2 - \varepsilon\right) G(\xi,\xi';\varepsilon) = -\delta(\xi-\xi')$$

и обнаружили, что она отвечает расходящейся сферической волне

$$G(\xi,\xi';\varepsilon) = -\frac{m}{2\pi}\frac{\exp\left[ik'|\xi-\xi'|\right]}{|\xi-\xi'|}$$

Сведём нашу задачку к уже решённой, положив

$$\frac{1}{2m} = 1 \qquad\qquad \varepsilon \equiv \frac{k'^2}{2m} + i\underbrace{\eta}_{\to 0} = 0 \Rightarrow k' = 0$$

Подставляем в «вечнозелёную» функцию, получаем

$$G(\xi,\xi';\varepsilon) = -\frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\xi-\xi'|}$$

А теперь подставим ответ в исходный дифур, и благополучно получим

$$\left(-\underbrace{\frac{1}{2m}}_{=1}\nabla^2 - \underbrace{\varepsilon}_{=0}\right)\left(-\frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\xi-\xi'|}\right) = -\delta(\xi-\xi') \Rightarrow \nabla^2\frac{1}{|\xi-\xi'|} = -\delta(\xi-\xi')$$

Рассмотрим ещё один полезный пример: найдём изображение по Фурье функции

$$f(\xi) = \frac{1}{|\xi|}$$

Если задействовать определение, то придётся считать интеграл

$$F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, \frac{1}{|\xi|}\exp(-ik\cdot\xi)$$

Однако «мы пойдём другим путём»: давайте отлапласим выражение

$$f(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, F(k)\exp(ik\cdot\xi)$$

В итоге получим

$$\nabla^2\frac{1}{|\xi|} = \nabla^2\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, F(k)\exp[ik\cdot\xi]$$

$$-4\pi\delta(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, F(k)(-k^2)\exp[ik\cdot\xi]$$

$$-4\pi\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, \exp[ik\cdot\xi] = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, F(k)(-k^2)\exp[ik\cdot\xi]$$

$$4\pi = k^2 F(k) \Rightarrow F(k) = \frac{4\pi}{k^2}$$

Наш результат

$$\boxed{\frac{4\pi}{k^2}=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\ \frac{1}{|\xi|}\exp\left[-ik\cdot\xi\right]}$$

$$\frac{1}{|\xi|}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dk\ \frac{4\pi}{k^2}\exp\left(ik\cdot\xi\right)$$

ФУРЬЕ-ОБРАЗ ФУНКЦИИ ГРИНА СВОБОДНОГО ЭЛЕКТРОНА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ПЛОТНОСТЬ ЧИСЛА СОСТОЯНИЙ

Одноэлектронное уравнение Шрёдингера

$$H-\varepsilon\ \ \varphi\ \ \xi\ \ =0$$

в простейших случаях, т.е. когда гамильтониан удаётся расщепить на невозмущённую (решение которой не вызывает существенных затруднений) и возмущённую составляющие, можно переписать так

$$H_0-\varepsilon\ \ \varphi\ \ \xi\ \ =-H_I\varphi\ \ \xi$$

Решая задачу на собственные значения для невозмущённой составляющей гамильтониана

$$\left(H_0-\varepsilon_j\right)\varphi_j\left(\xi\right)=0$$

в предположении, что функции $\varphi_j\left(\xi\right)$ *удовлетворяет периодическим граничным условиям на поверхности большого куба с длиной ребра* L *и объёмом* V*, мы выяснили, что можно рассматривать редуцированную функцию Грина, являющуюся решением уравнения*

$$\left(H_0-\varepsilon-i\eta\right)G\left(\xi;\varepsilon+i\eta\right)=\delta\left(\xi\right)$$

и вычисляемую по формуле

$$G\left(\xi,\xi';\varepsilon+i\eta\right)=\sum_j\frac{\varphi_j\left(\xi\right)\varphi_j^*\left(\xi'\right)}{\varepsilon-\varepsilon_j+i\eta}$$

Или переходя от суммы к интегралу

$$G\left(\xi,\xi';\varepsilon+i\eta\right)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int dk\,\frac{\exp\left[ik\cdot\left(\xi-\xi'\right)\right]}{\varepsilon-\varepsilon_k+i\eta}$$

Давайте рассматривать

$$G\left(\xi;\varepsilon+i\eta\right)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int dk\,\frac{\exp\left(ik\cdot\xi\right)}{\varepsilon-\varepsilon_k+i\eta}$$

Фурье-образ этой функции есть

$$G\left(k;\varepsilon+i\eta\right)=\int d\xi\ G\left(\xi;\varepsilon+i\eta\right)\exp\left(-ik\cdot\xi\right)$$

Насчёт обозначений следует иметь в виду, что закрепилась традиция использовать для функции Грина и её образа одну и ту же букву, так что обращайте внимание на аргумент (если указывается явно) или контекст.
Используем обратное преобразование Фурье, чтоб записать прообраз

$$G\left(\xi;\varepsilon+i\eta\right)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int dk\ G\left(k;\varepsilon+i\eta\right)\exp\left(ik\cdot\xi\right)$$

А теперь сравните последнее и пред-предпоследнее выражение и узрите замкнутое выражение для Фурье-образа свободной функции Грина

$$\boxed{G(k;\varepsilon+i\eta)=\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_k+i\eta}}$$

Давайте просуммируем левую и правую части равенства по k

$$\sum_k G(k;\varepsilon+i\eta)=\sum_k\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_k+i\eta}$$

Переходя в обеих частях равенства к интегралам, приходим к

$$\frac{V}{(2\pi)^3}\int dk\ G(k;\varepsilon+i\eta)=\int d\varepsilon_k\,\frac{g(\varepsilon_k)}{\varepsilon-\varepsilon_k+i\eta}$$

Использование для одного электрона функции $g(\varepsilon)$ *– «роскошь», тем не менее мы выпишем её с прицелом на будущие многоэлектронные задачи. Берём предел и пользуемся формулой Сохоцкого*

$$\lim_{\eta\to0}\frac{V}{(2\pi)^3}\int dk\ G(k;\varepsilon+i\eta)=\lim_{\eta\to0}\int d\varepsilon_k\,\frac{g(\varepsilon_k)}{\varepsilon-\varepsilon_k+i\eta}=-i\pi g(\varepsilon)+v.p.\int d\varepsilon_k\,\frac{g(\varepsilon_k)}{\varepsilon-\varepsilon_k}$$

А результате получаем важное соотношение

$$\boxed{g(\varepsilon)=-\frac{1}{\pi}\frac{V}{(2\pi)^3}\operatorname{Im}\lim_{\eta\to0}\int dk\ G(k;\varepsilon+i\eta)}$$

Объясните, почему в подынтегральном выражении нельзя положить $\eta=0$.

<u>КОНТУРНЫЕ ИНТЕГРАЛЫ</u>

Нам повстречаются определённые интегралы от функций вещественного переменного, вычисление которых проще производить, если рассматривать соответствующие им контурные интегралы на комплексной плоскости, поэтому освежим в памяти ТФКП.

Однозначная функция $f(z)$ *комплексного переменного* $z=x+iy$ *называется дифференцируемой в точке* z_0*, если предел*

$$f'(z_0)\equiv\lim_{z\to z_0}\frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0}$$

существует и не зависит от пути, по которому $z\to z_0$. *Функция, дифференцируемая в некоторой области, называется аналитической в этой области. «Второе имя» дифференцируемой функции мы дали, потому что аналитические функции обладают особенно приятным свойством – будучи дифференцируемы по определению всего один раз, они оказываются бесконечно дифференцируемы. Пользуясь произвольностью пути, по которому* $z\to z_0$, *можно установить необходимые и достаточные условия аналитичности функции* $f(z)=u(x,y)+iv(x,y)$ *в заданной области –* ***условия Коши-Римана***

$$\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}=\frac{\partial v(x,y)}{\partial y}$$

$$\frac{\partial u(x,y)}{\partial y}=-\frac{\partial v(x,y)}{\partial x}$$

Функцию, аналитическую в круге с центром в точке $z=z_0$, *можно разложить в этом круге в ряд Тейлора*

$$f(z)=\sum_{j=0,\infty} c_j (z-z_0)^j \qquad c_j=\frac{f^{(j)}(z_0)}{j!}$$

Вы знаете, что в некоторых функциях есть какая-нибудь изюминка и, зачастую, не одна. Точки, в которых функция не является аналитической, называются особенностями этой функции. Если в окрестности точки z_0 функцию можно представить в виде ***ряда Лорана***

$$f(z)=\sum_{j=-J,\infty} c_j (z-z_0)^j$$

Где J – конечное число, отличное от нуля, то говорят, что ***функция имеет полюс порядка J в точке*** *z_0. Если $J=\infty$, то в лице z_0 имеем* ***существенно особую точку****. Коэффициент c_{-1} имеет специальное наименование – его зовут* ***вычетом функции $f(z)$ в точке*** *z_0 и обозначают $res\left[f(z_0)\right]$. Коэффициент c_{-1} уважают за* ***теорему о вычетах****: если функция аналитична внутри и на границе области, представляющей собой замкнутый контур C без самопересечений, за исключением конечного числа полюсов z_p внутри этой области, то*

$$\oint_C f(z)dz=2\pi i\sum_p res\left[f(z_p)\right]$$

(контур при интегрировании обходим против часовой стрелки). Если функция аналитическая, то в правой части имеем нуль – это заключение и составляет содержание теоремы Коши. Теперь смотрим на ряд Лорана – видим, что для случая простого полюса (полюс первого порядка) вычет равен:

$$res\left[f(z_0)\right]=\lim_{z\to z_0}\left[(z-z_0)f(z)\right]$$

Чтобы посчитать вычет для случая полюса порядка J надо так поиздеваться над рядом, чтобы от него остался только c_{-1}, т.е. вот так

$$res\left[f(z_0)\right]=\frac{1}{(J-1)!}\lim_{z\to z_0}\frac{d^{J-1}}{dz^{J-1}}\left[(z-z_0)^J\ f(z)\right]$$

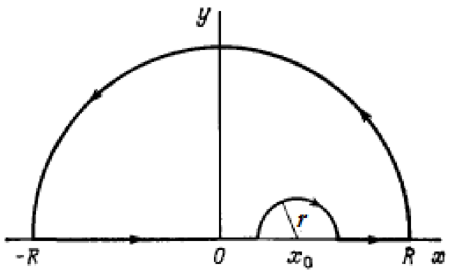
Приложим все эти «бабушкины» рецепты для вычисления главного значения по Коши интеграла от функции $f(x)$, имеющей простой полюс на действительной оси $x=x_0$:

$$v.p.\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx$$

Рассмотрим функцию $f(z)$ комплексного переменного z, равную $f(x)$ при вещественном z. Коль скоро она имеет простой полюс, то вблизи него может быть представлена в форме

$$f(z)=A(z)+c_{-1}(z-z_0)^{-1}$$

Функция $A(z)$ – аналитическая. Возьмём интеграл от $f(z)$ по такому вот контуру



Предположим, что интеграл по большой полуокружности стремится к 0 при бесконечно большом радиусе. По малой полуокружности

$$z = x_0 + r\exp(i\phi)$$

$$\textit{нам пригодится:}\quad dz = ri\exp(i\phi)d\phi$$

имеем

$$\int\limits_{C_r} f(z)dz = \int\limits_{C_r}\left[A(z) + c_{-1}(z - z_0)^{-1}\right]dz =$$

$$= ri\int\limits_{\pi}^{0}\left[A(z) + c_{-1}(z - z_0)^{-1}\right]\exp(i\phi)d\phi \boxed{=}$$

$$z_0 = x_0$$

$$z - z_0 = x_0 + r\exp(i\phi) - x_0 = r\exp(i\phi)$$

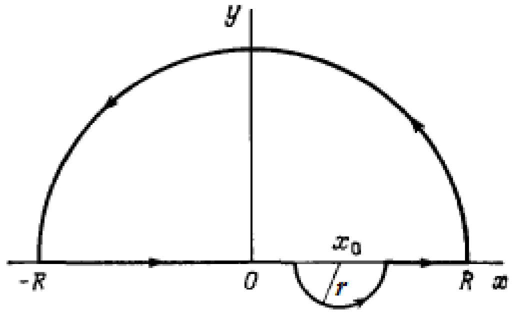
$$\boxed{=} 0 + ri\int\limits_{\pi}^{0} c_{-1}r^{-1}\exp(-i\phi)\exp(i\phi)d\phi = -i\pi c_{-1}$$

Итак, в пределе $R \to \infty$ *и* $r \to 0$ *получаем*

$$\oint f(z)dz = v.p.\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx - i\pi c_{-1} = 2\pi i\sum_{p_\uparrow} res\left[f\left(z_{p_\uparrow}\right)\right]$$

$$\boxed{v.p.\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 2\pi i\left(\frac{1}{2}res\left[f(x_0)\right] + \sum_{p_\uparrow} res\left[f\left(z_{p_\uparrow}\right)\right]\right)}$$

Вычеты берутся в полюсах функции в верхней полуплоскости (но не на действительной оси!) Посмотрите, к чему приведёт интегрирование по такому контуру



Полюс x_0 *окажется теперь внутри контура, знак интеграла по малой полуокружности будет другой – весь результат не изменится. Таким образом, можно прийти к заключению, что главное значение интеграла в смысле Коши равно среднему от двух значений контурного интеграла – по контурам с и без* x_0.

Примеры применения последней формулы в рамочке

Пример 1: предельная формула Сохоцкого

Получим предельную формулу Сохоцкого с помощью записанного выше соотношения.

Пусть

$$f(z) = \frac{\varphi(z)}{z - x_0 - i\eta}$$

Функция $f(z)$ *– аналитическая на вещественной оси и, не исключено, что имеет конечное число полюсов в верхней полуплоскости. Тогда в пределе* $\eta \to 0$ *она имеет простой полюс в точке* $x = x_0$. *Если*

$$\int\limits_{C_{R\to\infty}} f(z)\,dz = 0$$

то

$$\lim_{\eta\to 0}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\varphi(x)}{x-x_0-i\eta}dx = 2\pi i\sum_{p\uparrow} res\left[f\left(z_{p_\uparrow}\right)\right] = v.p.\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\varphi(x)}{x-x_0}dx + i\pi\varphi(x_0)$$

При получении последнего равенства мы использовали последний результат в рамочке. Таким образом, ещё раз доказана справедливость предельного перехода.

Пример2

Вычислим

$$v.p.\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\exp(-ixt)}{x-x_0}dx$$

(t *– отрицательная постоянная).*

Проинтегрируем функцию

$$f(z) = \frac{\exp(-izt)}{z-x_0}$$

по контуру, состоящему из окружности радиусом R *в верхней полуплоскости и отрезка вещественной оси от* $x=-R$ *до* $x=R$*, после чего устремим* $R\to\infty$*. На полуокружности имеем*

$$z = \mathrm{R}\ \exp(i\phi) \qquad 0<\phi<\pi$$

соответствующий интеграл

$$\int\limits_{C_R} dz\frac{\exp(-izt)}{z-x_0} = Ri\int\limits_0^{\pi}\exp(i\phi)\,d\phi\frac{\exp\left(-iR\cos(\phi)t - i^2R\sin(\phi)t\right)}{R\exp(i\phi)-x_0}$$

$$\left.\begin{matrix} t<0 \\ \sin(\phi)>0 \end{matrix}\right\}\Rightarrow \int\limits_{C_{R\to\infty}} ... = 0$$

Поэтому последняя формула в рамочке даёт

$$v.p.\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\frac{\exp(-ixt)}{x-x_0} = \pi i\exp(-ix_0t) \quad \text{при} \quad t<0$$

Покажите, что

$$v.p.\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\frac{\exp(-ixt)}{x-x_0} = -\pi i\exp(-ix_0t) \quad \text{при} \quad t>0$$

(полуокружность надо брать в нижней полуплоскости, чтобы занулить $\int\limits_{C_{R\to\infty}} ... = 0$ *)*