

Д. А. КИРЖНИЦ

ПОЛЕВЫЕ МЕТОДЫ ТЕОРИИ МНОГИХ ЧАСТИЦ



Государственное издательство литературы по атомной науке и технике
Государственного комитета по использованию атомной энергии СССР

МОСКВА 1963

ВВЕДЕНИЕ

В предлагаемой вниманию читателей книге описываются основные понятия и методы современной микроскопической теории систем многих частиц*. Эти методы, заимствованные из релятивистской теории квантованного поля и получившие развитие в последние годы, широко применяются в настоящее время в самых различных разделах физики.

Общая задача, стоящая перед теорией систем многих частиц, заключается во всестороннем описании как внутренних свойств таких систем, так и результатов их взаимодействия с внешними агентами. Имеются в виду такие характеристики системы, как ее энергетический спектр (энергия основного состояния, спектр возбужденных состояний), средние значения динамических переменных и их распределения, вероятности переходов и т. д. Сюда относятся также всевозможные термодинамические и кинетические характеристики системы. Модель рассматриваемой системы, т. е. характеристики отдельных частиц, закон их взаимодействия, внешние условия и т. д. должны задаваться при этом дополнительно как исходное условие.

Теория многих частиц, располагая определенными средствами для решения указанной задачи в том или ином приближении, служит теоретическим базисом многих разделов физической науки: физики конденсированной среды (в том числе твердого тела), физики плазмы, атомного ядра, атома и т. п.

Наиболее важная особенность задач, с которыми приходится иметь дело в теории многих частиц, состоит в принципиальной необходимости учета взаимодействия между частицами. Модель,

* Необходимо сразу же разъяснить термин «система многих частиц», который носит в общем условный характер. В дальнейшем мы будем исключать из числа систем многих частиц лишь одно- и двухчастичные системы, расчет которых элементарен. Уже такую систему, как, например, атом гелия, можно (и в ряде отношений целесообразно) рассматривать так же, как и систему, состоящую из большого числа частиц. Следует, однако, иметь в виду, что для системы со сравнительно малым числом частиц могут потерять свой смысл некоторые аспекты описания, в том числе статистический. Кроме того, при этом теряет силу целый ряд факторов, который упрощает рассмотрение систем, состоящих из большого числа частиц.

в которой это взаимодействие игнорируется (модель идеального газа), чрезвычайно бедна по своим свойствам и рассчитывается элементарным образом. Именно взаимодействие между частицами порождает то качественное многообразие объектов, которое свойственно перечисленным выше разделам физики.

Точный учет взаимодействия между частицами сколько-нибудь сложной системы представляет собой, однако, исключительную по трудности задачу. Хотя в последнее время и появились надежды на использование для этой цели вычислительных машин, реальные возможности, которыми располагает теория многих частиц, в целом еще довольно скромные (исключая теорию атома и молекулы).

Главная причина этих трудностей состоит в том, что уравнение Шредингера со многими переменными, не распадающееся на независимые уравнения для каждой из переменных, представляет собой в математическом отношении несравненно более сложный объект, чем, скажем, уравнение Шредингера для частицы во внешнем поле. В системе многих взаимодействующих частиц речь должна идти именно о нераспадающемся уравнении Шредингера. Это математически очевидное обстоятельство проявляется в физическом отношении следующим образом. Вследствие неразрывной силовой связи отдельной частицы с остальными частицами системы понятие о состоянии этой частицы, т. е. о ее волновой функции, энергии и т. п., теряет свой точный смысл. Строго говоря, речь может идти лишь о состоянии всей системы в целом. Поэтому учет взаимодействия между частицами означает в то же время качественный скачок в выборе самого объекта описания: в модели идеального газа таким объектом могла служить каждая из частиц в отдельности, в то время как в реальном случае — обязательно вся система в целом.

Из сказанного ясно, что решение задачи многих частиц может носить лишь приближенный характер*. За последние десятилетия в теории многих частиц было разработано большое число разнообразных приближенных методов. К их числу относятся: теория возмущений, методы Хартри — Фока, Томаса — Ферми, Дебая — Хюккеля, Бракнера, метод коллективных переменных и многие другие [1]. Эти методы безусловно сыграли огромную роль в развитии соответствующих разделов физики. Однако в целом ряде отношений состояющие теории многих частиц до последнего времени было малоудовлетворительным.

Прежде всего, многие из обсуждаемых методов очень громоздки. Этот упрек относится, в частности, к «старой» теории возмущений, оперирующей детерминантами Слейтера — Фока, сложными сум-

* Другой причиной приближенного характера решения многих задач являются неточные сведения о характере взаимодействия между частицами (примером может служить ядерное вещество). При этих условиях стремление к чрезмерно точному решению уравнений теории едва ли имеет смысл.

мами и т. д. Попытки продвинуться в вычислениях дальше второго, максимум третьего порядка, как правило, наталкиваются на серьезные технические трудности. При этом возникает и ряд трудностей более глубокого характера. Так, например, при вычислении энергии однородной системы появляются фиктивные члены, растущие с увеличением объема системы быстрее первой его степени. Весьма сложен также метод Бракнера [2], требующий проведения трудоемких численных расчетов.

Далее, обсуждаемые методы имеют заведомо ограниченную и самое главное далеко не всегда ясную из способа их формулировки область применимости. Вопросы об условиях, которым должны удовлетворять характеризующие систему параметры в области применимости данного метода, и об исправлении метода при нарушении этих условий в большинстве случаев были разработаны совершенно недостаточно.

Наконец, большую неудовлетворенность оставляло то обстоятельство, что формулировки ряда методов теории многих частиц носят зачастую искусственный, модельный характер и существенно меняются при переходе от метода к методу. В результате в значительной степени была утеряна глубокая внутренняя связь между разными методами, являющимися по своей сущности не чем иным, как различными приближениями к точному уравнению Шредингера.

В целом можно сказать, что необходимость замены отдельных частных методов теории многих частиц единым, общим и достаточно простым аппаратом ощущалась уже давно; в большой мере это диктовалось ростом круга и сложности задач, стоящих перед теорией. Удовлетворяющие соответствующим требованиям методы возникли, однако, лишь в самые последние годы. Эти методы (для краткости будем называть их полевыми) являются прямым и естественным развитием метода вторичного квантования и потому достаточно просты и компактны.

Основной элемент полевого описания — функции Грина — содержит многостороннюю физическую информацию о рассматриваемой системе; извлечение этой информации производится путем весьма несложных математических действий.

Анализ уравнений для функций Грина с учетом малости характеризующих систему безразмерных параметров открывает возможность упрощения этих уравнений. Существенную роль в этом отношении играет так называемая диаграммная техника, позволяющая с помощью несложных правил получить выражение для члена теории возмущений сколь угодно высокого порядка. Такой анализ дает прямое и надежное обоснование «старых» методов теории многих частиц, выясняет пределы применимости этих методов и позволяет их уточнять.

Переходя к краткой характеристике полевых методов теории многих частиц, сразу же отметим, что еще в первые годы становления квантовой механики системы частиц в ней возник подход,

носящий название метода вторичного квантования и содержащий по существу все необходимое для полевого описания системы многих частиц. Понятие частицы в этом методе отодвигается на задний план и его место занимает понятие квантованного поля $\psi(x)$, $\psi^+(x)$ (операторные функции уничтожения и рождения частиц); что же касается частицы, то она проявляется как квант этого поля. Процесс взаимодействия между частицами может быть интерпретирован как уничтожение частиц в начальном и рождение их в конечном состоянии. Вообще число частиц (в отличие от разности чисел частиц и дырок) в процессе взаимодействия не сохраняется. Важный процесс возбуждения системы также приобретает чисто полевою интерпретацию и в простейшем случае сводится к рождению пары — частица-дырка; обратный процесс возвращения системы в основное состояние отвечает аннигиляции этой пары. Таков далеко не полный перечень тех аспектов полевого описания, которые заложены в аппарате вторичного квантования.

В рамках теории многих частиц соответствующие возможности, однако, в этот первый период не получили развития, и приложение метода вторичного квантования к квантовой механике систем частиц ограничивалось до последнего времени сравнительно узкими рамками [см., однако, 3].

Ситуация коренным образом изменилась после того, как в тридцатые и особенно сороковые годы зародилась и стала развиваться теория элементарных частиц. Теория квантованного поля этих частиц с самого начала строилась по образцу теории систем многих частиц: на базе метода вторичного квантования. Большая физическая значимость этих исследований и в особенности наличие серьезных принципиальных трудностей привели к значительной концентрации усилий в области квантовой теории поля. В результате к началу пятидесятих годов было в основном завершено построение формального аппарата теории квантованного поля.

Этот аппарат в силу своего общего характера и несомненных преимуществ не мог не перерасти рамки теории элементарных частиц. Уже с середины пятидесятих годов начинают появляться первые работы по приложению полевых методов к системе многих частиц, т. е. к объекту, из которого эти методы в конечном счете и выросли. К настоящему времени число таких работ достигло нескольких сотен, и мы имеем сейчас в распоряжении вполне сформировавшийся, достаточно удобный и гибкий аппарат для исследования свойств систем многих частиц.

Необходимо подчеркнуть, что этот аппарат оказался в высокой степени адекватным важнейшему понятию физики систем многих частиц — понятию квазичастицы или элементарного возбуждения. Используя это понятие подход [4—5] служил в значительной степени залогом успехов, достигнутых в соответствующих разделах теории. Введение понятия квазичастицы позволяет формулировать ряд аспектов описания в одночастичной форме, т. е. рассматривать систему взаимодействующих частиц как сово-

купность в значительной мере независимых коллективных образований — квазичастиц. Полевые методы теории многих частиц дают естественное обоснование такого подхода и устанавливают пределы его применимости.

* * *

В основу книги положены циклы лекций, читавшихся автором в 1960 и 1961 гг. для сотрудников Физического института им. П. Н. Лебедева АН СССР и Физико-энергетического института Государственного комитета Совета Министров СССР по использованию атомной энергии. В связи с этим книга является не монографией, дающей более или менее законченное представление о современном уровне развития полевой теории многих частиц и ее многочисленных приложениях, а скорее носящим вводный характер руководством, которое рассчитано на читателя, не знакомого с квантовой теорией поля и испытывающего поэтому затруднения при освоении полевых методов.

Ограниченный характер задачи, которую ставил перед собой автор при написании книги, не мог не сказаться на охвате имеющегося в литературе материала. Стремление к возможно более подробному изложению материала заставило сузить круг рассматриваемых в книге вопросов *.

Не излагаются, в частности, феноменологические аспекты полевой теории многих частиц [8, 89], релятивистская теория систем многих частиц [11], полевая теория кинетических явлений [22]. Мы ограничиваемся рассмотрением наиболее важного случая систем ферми-частиц, охватывающего многоэлектронные и многонуклонные системы. Не излагаются также тесно связанные с теорией бозе-систем [19—21] вопросы теории сверхтекучего (сверхпроводящего) состояния [7—9, 30].

Для иллюстрации излагаемого в книге теоретического материала отобрано сравнительно небольшое число практических задач, относящихся к теории атомного ядра, плазмы, твердого тела и атома.

Глава I содержит вспомогательный материал, включающий необходимые для дальнейшего сведения из квантовой механики и отчасти из теории атомного ядра [23—28]. Изложена также теория псевдопотенциала, прямо и наглядно ведущая к выражению эффективного потенциала взаимодействия через амплитуду рассеяния частиц системы друг на друге. Кроме того, в гл. I приводится общая классификация систем многих частиц по силе взаимодействия между ними и степени сжатости системы. Эта классификация облегчает упрощение аппарата теории многих частиц. Особое внимание в гл. I уделяется методу вторичного квантования,

* Читатель, ознакомившийся по этой книге с основами полевой теории многих частиц, может найти интересующий его материал в работах [6—22]; там же имеется обширная библиография.

являющемуся, как это уже подчеркивалось, основой полевых методов.

Построение теории многих частиц, как и всякой приближенной теории, следует начинать с выбора подходящего нулевого приближения. В качестве такового в книге выбрано приближение Хартри — Фока, дающее наилучшее описание системы, совместимое с понятием об индивидуальных состояниях частиц. Такой выбор позволяет учесть значительную часть взаимодействия уже на первом этапе вычислений, что приводит к заметному упрощению последующих выкладок. В первую очередь это относится к сжатым системам. Обычный выбор в качестве нулевого приближения модели идеального газа в ряде задач оказывается недопустимо грубым, например в атомных задачах, где эффект экранировки кулоновского поля ядра играет существенную роль, оставаясь вне рассмотрения в модели идеального газа. Гамильтониан возмущения, описывающий так называемые эффекты силовой корреляции, может быть представлен в виде простого нормального произведения операторов, благодаря чему значительно сокращается число подлежащих рассмотрению диаграмм теории возмущений.

Изложению теории многих частиц в приближении Хартри — Фока посвящена гл. II. В основу положен весьма удобный операторный подход. С его помощью осуществлен переход к квазиклассическому предельному случаю приближения Хартри — Фока — приближению Томаса — Ферми. В качестве приложений даны некоторые вопросы теории сильно сжатого вещества и теории ядерного вещества. Рассмотрение последней продолжено в гл. III и IV.

В гл. III строится общий полевой аппарат теории возмущений, основанный на теории S -матрицы и включающий в себя в качестве важнейшего элемента диаграммную технику. Приведена формулировка правил Фейнмана для построения элемента S -матрицы любого порядка. Даны соотношения, позволяющие найти матрицу плотности и энергию основного состояния системы в любом порядке теории возмущений. Особое внимание в главе уделяется связи между классификацией систем и отбором тех диаграмм теории возмущений, которые играют в рассматриваемых условиях основную роль.

В качестве приложений даются теория двухэлектронных атомов и теория ядерного вещества с учетом корреляционных эффектов.

В гл. II и III рассматривается почти исключительно основное состояние системы.

В гл. IV описываются свойства одно- и двухчастичной функции Грина и способы извлечения заключенной в них физической информации о рассматриваемой системе. Сформулированы уравнения для определения функций Грина. Подробно рассмотрена задача о нахождении характеристик возбужденных состояний

системы. Дан вывод спектральных представлений функций Грина, на основе которых вводится понятие о квазичастицах и устанавливается связь характеристик квазичастиц с аналитическими свойствами функций Грина.

Далее в главе излагается общая теория разреженных систем многих частиц. Для них выводятся разложения физических величин в ряд по отношению амплитуды рассеяния к среднему расстоянию между частицами. Исследуются свойства фермиевского спектра возбуждений разреженных систем.

Подробно рассматриваются сжатые системы многих частиц как с кулоновскими, так и с короткодействующими силами. Исследуется бозевская ветвь возбуждений (плазмон, нулевой звук). Рассмотрены применения к проблеме плазменных колебаний в однородном электронном газе с компенсирующим фоном и атоме. Обсуждаются также некоторые приложения к теории ядра.

В гл. I—IV описание дается для температуры, равной нулю.

Исследованию поведения системы многих частиц в термостате и построению полевого аппарата квантовой статистики посвящена последняя, V глава книги. Рассмотрено приближение Хартри — Фока для «горячей» системы, которое применяется к выводу уравнения состояния такой системы.

Дано изложение как техники Матцубара, предназначенной для получения термодинамических характеристик системы, так и аппарата температурно-временных функций Грина, определяющего спектр возбуждений «горячей» системы.

Рассмотрены некоторые случаи применения этого аппарата к теории плазмы и коллективных колебаний.

Книга содержит также несколько приложений, в которые вынесен вспомогательный математический материал. В приложении А помещены правила вычисления средних значений всевозможных операторов физических величин. Приложение Б посвящено изложению основных правил и соотношений операторного исчисления. Подробно рассмотрены операторные функции от суммы некоммутирующих аргументов. Приложение В содержит основные сведения об интегралах от сингулярных функций и правилах их вычисления.

В книге приняты следующие основные обозначения.

Постоянная Планка \hbar принята равной единице.

Операторы обозначаются полужирным шрифтом, векторные величины снабжены сверху стрелкой.

Координата q означает совокупность пространственной \vec{x} , спиновой σ и изотопической τ координат; координата x объединяет q и время t . Соответственно

$$\int dq = \int d\vec{x} \sum_{\sigma\tau}, \quad \int d^4x = \int dq \int dt.$$

Функции $\delta(q - q')$ и $\delta^4(x - x')$ означают:

$$\delta(q - q') = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\tau\tau'},$$

$$\delta^4(x - x') = \delta(q - q') \delta(t - t').$$

Часто используется цифровое обозначение координат и времени:

$$(1) = (q_1, t_1), \int d1 = \int d^4x_1, \delta(1 - 2) = \delta^4(x_1 - x_2).$$

Трёхмерный дифференциал импульса имеет следующий вид:

$$d^3p = (2\pi)^{-3} dp_x dp_y dp_z.$$

Фурье-образ функции определяется соотношениями

$$\vec{f}_{\vec{p}} = \int d\vec{x} f(\vec{x}) \exp(-i\vec{p}\vec{x}),$$

$$f(\vec{x}) = \int d^3p \vec{f}_{\vec{p}} \exp(i\vec{p}\vec{x}).$$

Вводятся также четырехмерные импульсы $p = (\vec{p}, \epsilon)$:

$$(px) = \vec{p}\vec{x} - \epsilon t,$$

$$d^4p = d^3p \frac{d\epsilon}{2\pi},$$

$$\delta^4(p) = \delta(\vec{p}) \delta(\epsilon).$$

Четырёхмерный фурье-образ определен согласно условию

$$\vec{f}(p) = \int d^4x f(x) \exp[-i(px)],$$

$$f(x) = \int d^4p \vec{f}(p) \exp[i(px)].$$

Коммутаторы и антикоммутаторы операторов обозначаются соответственно прямыми и фигурными скобками.

$$[a, b] = ab - ba, \quad \{a, b\} = ab + ba.$$

* * *

Автор глубоко признателен И. Е. Тамму и В. Л. Гинзбургу, по инициативе и при поддержке которых было предпринято написание этой книги, Е. Л. Фейнбергу, просмотревшему рукопись и высказавшему ряд ценных замечаний и советов, и А. С. Давыдову, ознакомившемуся с первым вариантом рукописи. Работая над книгой, автор учёл замечания и советы большого числа лиц. Всем им, в особенности В. Н. Алямовскому, Г. М. Ваградову, Л. В. Келдышу, Е. С. Фрадкину и В. В. Шмидту, автор приносит глубокую благодарность.

ГЛАВА I

НЕОБХОДИМЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 1. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА И КЛАССИФИКАЦИЯ СИСТЕМ МНОГИХ ЧАСТИЦ

1. 1. Полевые методы квантовой теории многих частиц базируются в конечном счете на обычном уравнении Шредингера:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi(Q, t) = 0. \quad (1. 1)$$

Здесь $Q = \{q_1, \dots, q_N\}$ — совокупность координат системы N частиц; под q_i понимаются как пространственные \vec{x}_i , так и дискретные (спиновые σ_i , изотопические τ_i) координаты i -й частицы. Гамильтониан H считается заданной функцией координат, операторов импульса $\vec{p} = -i\nabla$ и матриц, действующих на дискретные координаты.

В дальнейшем будем предполагать, что гамильтониан не зависит явно от времени. Это позволяет ввести понятие о стационарных состояниях системы, отвечающих энергии E ,

$$\left. \begin{aligned} \Psi(Q, t) &= \exp(-iEt) \Psi(Q), \\ (H - E) \Psi(Q) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (1. 2)$$

Состояние с наименьшим значением энергии носит название основного. В дальнейшем речь будет идти почти исключительно о стационарных состояниях системы.

Волновая функция системы тождественных фермионов должна быть антисимметричной функцией их координат. Определенным видоизменением аппарата теории можно добиться распространения этого свойства и на системы различных по своей природе частиц, если ограничиться приближением, в котором их характеристики (массы, законы взаимодействия и т. п.) совпадают. Важнейшим примером такого рода является система протонов и нейтронов в пренебрежении их электромагнитными взаимодействиями.

Антисимметрия волновой функции достигается при этом введением дополнительной изотопической степени свободы частицы, позволяющей трактовать протон и нейтрон как разные состояния единой частицы — нуклона *.

1. 2. Гамильтониан системы может быть представлен в виде суммы двух слагаемых $H = H_F + H_I$. Свободный гамильтониан H_F представляет собой сумму операторов кинетической энергии частиц и энергии их взаимодействия с внешним полем U :

$$\left. \begin{aligned} H_F &= \sum_{i=1}^N T_i, \\ T &= p^2/2M + U(q). \end{aligned} \right\} \quad (1.3)$$

Гамильтониан взаимодействия H_I содержит члены, отвечающие парному, тройному и т. д. взаимодействию между частицами. Чаще всего приходится иметь дело с парным взаимодействием

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{i, j=1}^N ' V_{ij} \quad (1.4)$$

(штрих у суммы означает пропуск слагаемого с $i = j$).

В теории многих частиц потенциал взаимодействия V считается заданной функцией координат частиц, их спинов, импульсов и т. п. **. Вид этой функции выбирается либо из теоретических соображений (электромагнитные взаимодействия), либо заимствуется непосредственно из опыта.

В некоторых случаях оказывается полезным введение эффективного потенциала взаимодействия, нахождение которого требует уже специальных вычислений. Так обстоит, например, дело при рассмотрении системы частиц двух сортов (для определенности a и b), если частицы a интересуют нас не сами по себе, а лишь с точки зрения их влияния на движение частиц b . Учет этого влияния, сводящийся к исключению динамических переменных частиц a , приводит к эффективному изменению потенциала взаимодействия между частицами b .

С подобной ситуацией приходится сталкиваться в проблеме сверхпроводимости металлов, где объектом рассмотрения является система электронов и атомов решетки. Эффективный потенциал взаимодействия между электронами, учитывающий колебания решетки, может радикальным образом отличаться от исходного кулоновского потенциала. Это обстоятельство лежит в основе существующей теории сверхпроводимости [9, 30].

* Подробнее см. в работе [28]. Там же можно найти необходимые для дальнейшего сведения об аппарате изотопического спина.

** В дальнейшем, имея в виду нерелятивистский характер движения частиц, мы будем пренебрегать электромагнитным запаздыванием их взаимодействия. При необходимости учета запаздывания в нижнем порядке по $1/c^2$ можно пользоваться потенциалом Брейта [29], относящимся к классу взаимодействий, зависящих от импульса.

1. 3. В простейших случаях потенциал взаимодействия представляет собой функцию только координат частиц. Примером может служить кулоновское взаимодействие (e — заряд частицы; $r_{ij} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j|$)

$$V_{ij} = \frac{e^2}{r_{ij}}. \quad (1.5)$$

Потенциал взаимодействия может зависеть также от операторов импульса, спина и т. д. С физической точки зрения это означает, что самый характер взаимодействия между частицами (величина взаимодействия, его знак) зависит от того состояния, в котором они находятся. Такими свойствами обладают взаимодействия между сложными частицами — атомами, молекулами, ядрами, а также взаимодействия между нуклонами. Именно этот последний случай мы будем иметь в виду в этом и следующем разделах.

Потенциал взаимодействия включает в себя при этом ряд типичных комбинаций операторов. К их числу относятся прежде всего операторы обмена пространственных $\mathcal{F}_{ij}^{(x)}$, спиновых $\mathcal{F}_{ij}^{(\sigma)}$ и изотопических $\mathcal{F}_{ij}^{(\tau)}$ координат, меняющие местами при действии на волновую функцию соответствующие координаты i -й и j -й частиц. В явной форме можно написать [23]

$$\mathcal{F}_{ij}^{(\sigma)} = \frac{1 + \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j}{2}; \quad \mathcal{F}_{ij}^{(\tau)} = \frac{1 + \vec{\tau}_i \vec{\tau}_j}{2}, \quad (1.6)$$

где $\vec{\sigma}$ и $\vec{\tau}$ — матрицы Паули, действующие на соответствующие координаты. Что же касается оператора $\mathcal{F}^{(x)}$, то он выражается явным образом через оператор импульса частиц. В пренебрежении электромагнитными эффектами оператор $\mathcal{G}^{(x)}$ сводится к $-\mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{G}^{(\tau)}$. Это обстоятельство связано с антисимметрией волновой функции

$$\mathcal{F}\Psi \equiv \mathcal{F}^{(x)} \mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{F}^{(\tau)} \Psi = -\Psi.$$

Общее выражение для потенциала обменных сил может быть записано в виде

$$V = V_W(r) + V_B(r) \mathcal{F}^{(\sigma)} + V_H(r) \mathcal{F}^{(\tau)} - V_M(r) \mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{F}^{(\tau)}, \quad (1.7)$$

где отдельные члены носят название соответственно сил Вигнера, Бартлета, Гейзенберга и Майорана. Особо выделяют силы Сербера, содержащие характерную комбинацию,

$$S = \frac{1}{2} (1 + \mathcal{F}^{(x)}) = \frac{1}{2} (1 - \mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{F}^{(\tau)}). \quad (1.8)$$

Эти силы отличны от нуля лишь в состояниях с четным значением орбитального момента относительного движения частиц.

Наряду с собственно ядерными силами, не зависящими от рода взаимодействующих нуклонов, необходимо учитывать кулоновское взаимодействие, присущее только протонам. Чтобы отразить

это обстоятельство, следует ввести операторы $\xi_{(p)}$ и $\xi_{(n)}$, выделяющие соответственно протонное и нейтронное состояния:

$$\xi_{(p)} = \frac{1}{2}(1 + \tau_3), \quad \xi_{(n)} = \frac{1}{2}(1 - \tau_3), \quad (1.9)$$

где τ_3 — соответствующая матрица Паули. Потенциал кулоновского взаимодействия между нуклонами имеет следующий вид:

$$V_{(k)ij} = \xi_{(p)i} \xi_{(p)j} \frac{e^2}{r_{ij}}. \quad (1.10)$$

Кроме того, потенциал нуклонного взаимодействия содержит члены, отвечающие тензорным и спин-орбитальным силам и зависящие от операторов спина и относительного момента количества движения. Явные выражения потенциалов этих сил в дальнейшем не понадобятся.

1.4. Говоря о потенциале взаимодействия между частицами многонуклонной системы, следует иметь в виду, что какие-либо прямые данные, касающиеся этого потенциала, по существу отсутствуют. С одной стороны, теоретическое решение вопроса о взаимодействиях в многонуклонной системе могло бы быть получено лишь на основе мезонной теории таких систем. Подобной теории, однако, до настоящего времени не существует. С другой стороны, опытные данные по взаимодействию нуклонов, которыми располагает ядерная физика, относятся почти исключительно к паре изолированных частиц (рассеяние нуклонов на нуклонах, дейтрон и т. д.).

Ввиду сравнительной малости расстояния между частицами в реальных многонуклонных системах предположение о совпадении потенциалов взаимодействия между изолированными нуклонами и нуклонами, входящими в состав системы, представляется априори маловероятным. С этой точки зрения возможно появление многочастичных — тройных, четверных и т. п. — сил взаимодействия между нуклонами.

Следует, однако, отметить, что какие-либо убедительные количественные оценки роли многочастичных сил до настоящего времени отсутствуют и в целом обсуждаемый вопрос остается пока открытым.

В связи с этим в теории ядра наряду с феноменологическим существует и другое направление, основанное на предположении о малости многочастичных сил. Благодаря этому предположению для вычисления характеристик многонуклонной системы можно использовать эмпирический потенциал взаимодействия между изолированными частицами. Сравнивая вычисленные таким образом величины с результатами опыта, можно в принципе найти пределы применимости указанного предположения.

Такое сравнение, проведенное к настоящему времени уже для целого ряда характеристик атомного ядра, не привело пока к сколько-нибудь заметным противоречиям. Это позволяет думать,

что микроскопическая теория атомного ядра, основанная на использовании эмпирического парного потенциала взаимодействия, может претендовать (по крайней мере в области невысоких энергий) на возможность качественного, а в целом ряде отношений и количественного описания ядра.

Поэтому в дальнейшем при рассмотрении многонуклонной системы будет использован эмпирический парный потенциал взаимодействия. В целях упрощения выкладок этот потенциал выбирается в следующей приближенной форме * [31]:

$$V = V_{(a)} + V_{(c)} + V_{(k)}. \quad (1. 11)$$

Здесь $V_{(a)}$ — главная часть взаимодействия, обеспечивающая притяжение между нуклонами. Она имеет характер сил Сербера:

$$V_{(a)} = V_{(a)}(r) S.$$

Функцию $V_{(a)}(r)$ можно аппроксимировать прямоугольной потенциальной ямой:

$$V_{(a)}(r) = -V_0 \quad (c < r < a), \quad V_{(a)}(r) = 0 \quad (r < c, r > a).$$

Численно можно принять

$$V_0 = \frac{\pi^2}{4M(a-c)^2} \approx 28 \text{ Мэв},$$

$$a \approx 2,3 \text{ ферми}, \quad c \approx 0,4 \text{ ферми}.$$

На малых расстояниях действуют интенсивные силы отталкивания вигнеровского типа («твердая сердцевина») [35]:

$$V_{(c)}(r) = \infty \quad (r < c); \quad V_{(c)}(r) = 0 \quad (r > c).$$

Наконец, $V_{(k)}$ — кулоновское взаимодействие между протонами [см. выражение (1. 10)].

Приведенное выражение для V не отражает ряда особенностей реальных ядерных сил: некоторого различия во взаимодействии в синглетном и триплетном спиновых состояниях (для системы протон — нейтрон при четных значениях орбитального момента l), отличия от нуля дальнедействующего потенциала при нечетных l , заметной роли тензорных и спин-орбитальных сил и т. д.

Следует, впрочем, заметить, что роль перечисленных эффектов заметна в основном лишь с точки зрения задачи двух тел. При рассмотрении интегральных характеристик многонуклонной системы вклад этих эффектов за счет усреднения оказывается в значительной степени подавленным. Поэтому потенциал (1. 11), будучи достаточно простым и удобным для расчетов, отражает некоторые усредненные свойства ядерных сил, что делает его пригодным для рассмотрения ряда задач теории ядерного вещества. Учет перечисленных эффектов в рамках излагаемых ниже методов не вызывает никаких принципиальных затруднений.

* Подробные сведения об общей структуре ядерных сил можно найти в работах [28, 32]. Сводка полуэмпирических выражений для V содержится в работах [33] и в статье Хюлтена [34].

1. 5. Большим формальным неудобством выражения (1. 11) является наличие явной бесконечности в потенциале $V_{(c)}$. Хотя никаких трудностей физического порядка при этом не возникает (дело сводится просто к невозможности сближения нуклонов до расстояний, меньших c), проведение соответствующих выкладок крайне усложняется. Если относительный импульс k сталкивающихся нуклонов имеет достаточно малую величину

$$kc \ll 1, \quad (1. 12)$$

то оказывается возможным заменить потенциал $V_{(c)}$ некоторым другим эквивалентным ему потенциалом, не содержащим уже явных бесконечностей [36, 37].

С этой целью рассмотрим несколько более общую задачу о рассеянии пары изолированных частиц с потенциалом взаимодействия между ними $V(r)$, отличным от нуля лишь в области $r < c$; в частности, этот потенциал может совпадать с $V_{(c)}$. Уравнение Шредингера в системе центра масс может быть записано в виде (M — масса частицы)

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{r}) = MV(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (1. 13)$$

Его решение в области $r > c$ удовлетворяет свободному уравнению Шредингера и имеет вид

$$\psi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r}) + \left[a_0(\vec{k}) + a_1(\vec{k}) \frac{kV}{ik^2} + \dots \right] \frac{\exp(ikr)}{r}. \quad (1. 14)$$

Здесь $a_l(k)$ — парциальная амплитуда рассеяния с моментом l ; мы ограничились рассмотрением s - и p -волн, играющих при выполнении условия (1. 12) определяющую роль.

В области $r < c$ решение уравнения (1. 13), разумеется, не имеет ничего общего с выражением (1. 14). Однако при выполнении условия (1. 12) детали поведения волновой функции внутри сравнительно узкой области действия сил не должны играть существенной роли. Из-за соотношения неопределенностей эффективное расстояние между частицами порядка $1/k \gg c$. Поэтому частицы в указанной области проводят сравнительно малое время. Можно поэтому считать, что выражение (1. 14) справедливо не только при $r > c$, но и при $r < c$. Соответственно можно поставить вопрос о нахождении такого потенциала взаимодействия $V_{\text{эф}}$, который приводит к выражению (1. 14), справедливому при всех r .

Действуя оператором $\Delta + k^2$ на функцию (1. 14) и учитывая соотношение $\Delta^1/r = -4\pi\delta(\vec{r})$, можно написать для левой части уравнения (1. 13)

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{r}) = -4\pi \left(a_0 + a_1 \frac{kV}{ik^2} + \dots \right) \delta(\vec{r}). \quad (1. 15)$$

Сравнивая это выражение с правой частью уравнения (1. 13), можно найти вид искомого потенциала $V_{\text{эф}}$.

Рассмотрим сначала s -рассеяние, играющее основную роль. Исходя из легко проверяемого соотношения

$$\delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} (r\psi(\vec{r})) = (1 + ika_0) \delta(\vec{r}),$$

и сравнивая правые части уравнений (1.15) и (1.13), нетрудно прийти к следующему выражению для искомого потенциала:

$$V_{эфф}(\vec{r}) = -\frac{4\pi}{Mk} \operatorname{tg} \delta_0(k) \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r}\right), \quad (1.16)$$

где $\delta_0(k)$ — фаза s -рассеяния

$$a_0 = \frac{1}{2ik} [\exp(2i\delta_0) - 1].$$

Для потенциала $V_{(c)}$ фаза $\delta_0(k) = -kc$ и в низшем порядке по параметру kc можно написать окончательно

$$V_{эфф}(\vec{r}) = \frac{4\pi c}{M} \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r}\right). \quad (1.17)$$

Потенциал (1.17), носящий название псевдопотенциала, несравненно более удобен для вычислений, чем исходный потенциал $V_{(c)}$. Входящий в него оператор $1 + r \frac{\partial}{\partial r}$ сводится к единице при действии на регулярную в точке $r = 0$ функцию и дает нуль при действии на функцию, имеющую особенность типа $1/r$. Благодаря наличию оператора $1 + r \frac{\partial}{\partial r}$ псевдопотенциал (1.17) может быть использован для расчетов в высших приближениях теории возмущений. В этом отношении он существенно отличается от псевдопотенциала Ферми [32], который пригоден лишь для расчетов в первом борновском приближении.

Следует подчеркнуть, что при выводе выражения (1.16) было использовано только условие (1.12), означающее малость радиуса действия сил по сравнению с длиной волны относительного движения частиц $1/k$. Малость амплитуды рассеяния по сравнению с $1/k$ при этом не использовалась. Поэтому выражение (1.16) пригодно, вообще говоря, и для описания резонансной ситуации, когда $\delta_0 \approx \pi/2$.

Перейдем к нахождению поправок к псевдопотенциалу (1.17), имеющих относительный порядок $(kc)^2$ (линейные члены, как оказывается, при этом отсутствуют). Прежде всего необходимо учесть следующий член разложения по kc величины $\operatorname{tg} \delta_0(k)$ в выражении (1.16). Оставаясь в рамках принятого приближения, можно

произвести, согласно уравнению (1. 15), замену $k^2 \rightarrow -\Delta$, а также опустить оператор $1 + r \frac{\partial}{\partial r} *$. Это дает

$$\delta_0 V_{\text{эфф}}(\vec{r}) = -\frac{4\pi c^3}{3M} \delta(\vec{r}) \Delta. \quad (1. 18)$$

Здесь и ниже

$$\nabla = \frac{(\nabla_{x_i} - \nabla_{x_j})}{2}.$$

Помимо этого, поправочные члены рассматриваемого порядка получаются за счет p -рассеяния. Подставляя в уравнение (1. 15) соотношение

$$\begin{aligned} (\vec{k}\nabla) \delta(\vec{r}) &= -i \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha} [\delta(\vec{r}) \nabla_{\alpha} \exp(i\vec{k}\vec{r})] \cong \\ &\cong -i \sum_{\alpha} [\nabla_{\alpha} \delta(\vec{r}) \nabla_{\alpha} + \delta(\vec{r}) \Delta] \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

и учитывая, что для потенциала $V_{(c)}$ $a_1(k) = -k^2 c^3$, будем иметь

$$\delta_1 V(\vec{r})_{\text{эфф}} = -\frac{4\pi c^3}{M} \left[\sum_{\alpha} \nabla_{\alpha} \delta(\vec{r}) \nabla_{\alpha} + \delta(\vec{r}) \Delta \right]. \quad (1. 19)$$

В заключение коснемся вопроса о погрешности, связанной сделанным выше предположением о возможности замены точной волновой функции выражением (1. 14). Очевидно, что эта погрешность будет сказываться лишь на членах высшего порядка по параметру kc . Анализ показывает [38], что соответствующий относительный вклад оказывается по крайней мере порядка $(kc)^3$ и может поэтому не учитываться.

1. 6. Из входящих в уравнение Шредингера величин можно составить в общем случае два независимых безразмерных параметра. Один из них — параметр взаимодействия α — определяется отношением средней энергии взаимодействия пары частиц к их средней кинетической энергии. Другой — параметр сжатости η — равен отношению эффективного радиуса действия сил к среднему расстоянию между частицами.

Соответственно величине этих параметров можно классифицировать системы многих частиц по двум признакам: по силе взаимодействия между частицами и по степени сжатости системы. Взаимодействие в системе считается большим или малым в зависимости от того, велик или мал по сравнению с единицей параметр α . Аналогично система относится к классу сжатых или раз-

* В дальнейшем формула (1. 18) будет использована лишь в первом борновском приближении, где этот оператор действует на регуляризованную в точке $r = 0$ функцию.

реженных в соответствии с тем, велик или мал параметр η . Такая классификация оказывается весьма полезной для выбора подходящего приближенного метода описания системы (см. § 16).

Важно подчеркнуть, что малость параметра α в сжатых системах отнюдь не означает малости эффектов взаимодействия в целом по системе. Дело в том, что в сжатых системах внутри радиуса действия сил находится много частиц, поэтому полная энергия взаимодействия может достигать при этом заметной величины и даже превышать значение полной кинетической энергии.

Перейдем к конкретному рассмотрению введенных параметров. Системы с кулоновскими и короткодействующими силами требуют отдельного исследования.

Система частиц, связанных короткодействующими силами, характеризуется следующими величинами: массой частиц M , средней величиной потенциала взаимодействия V_0^* и радиусом действия сил R . Сюда следует еще добавить среднюю плотность числа частиц $\bar{\rho}$ или связанное с ним среднее расстояние между частицами $d = \left(\frac{3}{4\pi\bar{\rho}}\right)^{1/3}$. Если система находится в газоподобном (несвязанном) состоянии или подвергнута принудительному сжатию, то величина d должна задаваться независимо, например через граничные условия задачи. Если же система находится в связанном состоянии (например, атомное ядро), то величина d может быть в принципе выражена через M , V_0 и R .

Система с кулоновским взаимодействием характеризуется меньшим числом параметров: M , d и e (заряд частиц). Понятие радиуса действия для кулоновских сил отсутствует. Заметим, впрочем, что имеется возможность ввести понятие об эффективном радиусе действия сил, роль которого играет радиус дебаевского экранирования [4, 39] (см. § 16 и 27):

$$R_0 \sim \frac{v_0}{\omega_L}, \quad (1.20)$$

где v_0 — характерная величина скорости частицы; $\omega_L = \left(\frac{4\pi\bar{\rho}e^2}{M}\right)^{1/2}$ — частота плазменных колебаний.

При рассмотрении систем с короткодействующими силами речь будет идти исключительно о случае нулевой температуры **. Для систем с кулоновскими силами значительный интерес представляет также и противоположный предельный случай высоких температур.

* Случай потенциала «твердой сердцевины» особый. Он будет рассмотрен ниже.

** «Горячие» системы такого рода не представляют большого интереса, так как роль тепловой энергии у них мала. Так, например, возбужденному атомному ядру может быть приписана температура всего лишь порядка $1 Mэв$.

1. 7. Рассмотрим сначала систему с короткодействующими силами. Как уже говорилось, параметр сжатости η определяется отношением

$$\eta = \frac{R}{d}. \quad (1. 21)$$

Если потенциал взаимодействия содержит два радиуса действия сил, то система может быть сжатой по отношению к одному из радиусов и разреженной по отношению к другому. Это характерно, например, для потенциала ядерных сил (см. раздел 1. 4). В этом случае силы притяжения имеют радиус $a \approx 2,3$ ферми, силы отталкивания — $c \approx 0,4$ ферми, среднее расстояние между частицами ядра равно примерно 1,3 ферми. Поэтому атомное ядро является сравнительно сжатой системой по отношению к силам притяжения и сравнительно разреженной по отношению к силам отталкивания.

Определим выражение для параметра взаимодействия α . В сжатых системах средняя энергия взаимодействия пары частиц порядка V_0 , их средняя кинетическая энергия порядка $p_0^2/M \sim (Md^2)^{-1}$, где $p_0 \sim 1/d$ — характерное значение импульса. Отсюда

$$\alpha \sim MV_0 d^2. \quad (1. 22)$$

В разреженных системах оценка кинетической энергии остается прежней, но эффективная энергия взаимодействия оказывается в $(d/R)^3$ раз меньше, чем для сжатых систем; это связано с тем, что частицы проводят в области действия сил лишь малую долю времени. Поэтому

$$\alpha \sim MV_0 R^3 d^{-1}. \quad (1. 23)$$

Существенную роль при рассмотрении разреженных систем играет также параметр

$$\alpha' \sim MV_0 R^2 \sim \alpha/\eta, \quad (1. 24)$$

появляющийся при описании рассеяния изолированных частиц и определяющий применимость борновского приближения [24].

Если параметр α' не мал по сравнению с единицей, то можно привести другую формулу для параметра α , позволяющую включить в рассмотрение потенциал «твердой сердцевины» и переходящую при $\alpha' \rightarrow 0$ в соотношение (1. 23). Записав $V_0 R^3$ в виде $\int d\vec{r} V(\vec{r})$ и подставив выражение для псевдопотенциала * [см. выражение (1. 16)], получим

$$\alpha \sim l/d, \quad (1. 23')$$

* Условие разреженности фактически совпадает с неравенством (1. 12), так как $k \sim 1/d$, поэтому переход к псевдопотенциалу в данном случае оправдан.

где $l = -\frac{\text{tg } \delta(k)}{k}$ — длина рассеяния. Для потенциала «твердой сердцевины» $l \approx c$ и

$$\alpha \sim \eta \ll 1. \quad (1.25)$$

При резонансном рассеянии $\delta \approx \pi/2$, $l \gg d$, и мы получаем $\alpha \gg 1$; взаимодействие между частицами играет при этом заметную роль, несмотря на разреженность системы.

Проанализируем, исходя из приведенных соотношений, потенциал ядерных сил. Для сил притяжения между нуклонами в атомном ядре соотношение (1.22) дает значение α , численно близкое к единице. Эти силы нужно, таким образом, отнести к взаимодействиям промежуточной интенсивности. Принудительно сжатую систему нуклонов, рассматриваемую в астрофизике, можно отнести уже к системам со слабым взаимодействием. Так, для системы, имеющей плотность 10^{14} г/см³, параметр α оказывается порядка 1/2.

Потенциал «твердой сердцевины» в ядре также относится к разряду слабых взаимодействий [см. выражение (1.25)], однако при сжатии системы соответствующий параметр α стремится к единице.

Особый случай представляют собой сильно разреженные многонуклонные системы, среднее расстояние между частицами которых превышает радиус действия сил притяжения. Взаимодействие в таких системах носит резонансный характер: наличие уровня (реального или виртуального) малой энергии приводит к большой величине длины рассеяния ($l \sim 20$ ферми). Соответствующий параметр α оказывается большим. Есть основания думать, что подобная ситуация может представлять интерес для проблемы нейтронной материи [40] (см. § 7 и 27).

1.8. Рассмотрим систему с кулоновским взаимодействием в случае нулевой температуры.

Удобно с самого начала ввести величину $a_0 = (Me^2)^{-1}$ — радиус боровской орбиты. Учитывая, что $\rho_0 \sim Mv_0 \sim 1/d$, из соотношения (1.20) получим следующее выражение для дебаевского радиуса:

$$R_0 \sim (a_0 d)^{1/2}, \quad (1.26)$$

откуда параметр сжатости

$$\eta \sim (a_0/d)^{1/2}. \quad (1.27)$$

Система, таким образом, считается сжатой или разреженной в зависимости от соотношения среднего расстояния между частицами и радиуса боровской орбиты.

Выражение для параметра взаимодействия α в случае сжатых кулоновских систем можно получить из соотношения (1.22), подставляя вместо V_0 величину e^2/d — кулоновскую энергию, отнесенную к среднему расстоянию между частицами. Это дает

$$\alpha \sim \frac{d}{a_0} \sim \frac{e^2}{v_0} \sim (a_0 \rho_0)^{-1}. \quad (1.28)$$

Выражение $\alpha \sim e^2/v_0$ часто используется в литературе.

Разреженных кулоновских систем, у которых $d \gg a_0$, мы не будем касаться. Большая величина кулоновского взаимодействия в таких системах приводит к их переходу в конденсированное состояние [41, 42]. Физически это связано с тем, что в газовом состоянии не может быть выполнена теорема вириала из-за малости кинетической энергии по сравнению с кулоновской. Образование конденсата восстанавливает баланс энергии, поскольку колебания частиц около положений равновесия приводят к должному увеличению их кинетической энергии. Поэтому увеличение расстояния между частицами не только не препятствует, а, наоборот, способствует появлению в системе ближнего порядка.

Оценим величину параметра α для некоторых реальных систем. Атомное ядро, например, оказывается системой со слабым кулоновским взаимодействием. В самом деле, величина d для такой системы равна примерно 1 ферми, а боровский радиус протона — 30 ферми. Для электронов проводимости металла параметр α имеет порядок единицы. В атоме с числом электронов Z параметр $\alpha \sim Z^{-2/3}$ и при больших Z мал (см. § 5).

Как видно из изложенного, параметры α и η в кулоновской системе не независимы: сжатая система, например, одновременно является системой со слабым взаимодействием.

Также обстоит дело и в случае высоких температур. При этом роль кинетической энергии играет величина kT , соответственно $v_0 \sim (kT/M)^{1/2}$, откуда

$$R_0 \sim \left(\frac{kTd^3}{e^2} \right)^{1/2}, \quad \eta \sim \left(\frac{kTd}{e^2} \right)^{1/2}, \quad \alpha \sim \left(\frac{e^2}{dkT} \right). \quad (1.29)$$

Отметим, что (как следует из выражения для η) с увеличением расстояния между частицами система становится по принятому определению не разреженной, а, напротив, более сжатой. Этот несколько парадоксальный вывод связан с тем, что величина дебаевского радиуса быстро растет с увеличением расстояния между частицами.

§ 2. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

2. 1. Кроме способа, изложенного в § 1, возможны и другие способы описания квантовой системы — другие представления. При переходе к новому представлению наблюдаемые величины — собственные значения операторов, их средние значения, вероятности переходов и т. д. — должны, разумеется, оставаться неизменными.

Переход от одного представления к другому осуществляется с помощью унитарного оператора перехода U . Соответствующее изменение волновой функции дается соотношением

$$\Psi' = U\Psi, \quad (2.1)$$

а изменение оператора физической величины α соотношением

$$\alpha' = U\alpha U^{-1}. \quad (2. 2)$$

Штрихом снабжены преобразованные величины.

Легко видеть, что матричные элементы оператора при переходе к новому представлению вообще не меняются:

$$\langle \Psi'_1 | \alpha' | \Psi'_2 \rangle = \langle \Psi_1 | \alpha | \Psi_2 \rangle. \quad (2. 3)$$

Благодаря этому остаются неизменными и перечисленные выше наблюдаемые величины.

2. 2. Переходом к новому представлению можно добиться прежде всего изменения характера зависимости волновой функции и операторов от времени. Имеется возможность полностью или частично «перенести» эту зависимость с волновой функции на операторы.

В исходном уравнении (1. 1) от времени зависит лишь волновая функция, а не операторы физических величин. Такой способ описания отвечает представлению Шредингера.

Представление же Гейзенберга характеризуется тем, что от времени зависит не волновая функция, а операторы. Снабдим величины, относящиеся к этому представлению, индексом «г». Приравнявая нулю производную $\Psi_g = U\Psi$ по времени и учитывая уравнение (1. 1), получим

$$i\partial U/\partial t = -UH.$$

Требую, чтобы при $t = 0$ величины в обоих рассматриваемых представлениях совпадали, найдем $U = \exp(iHt)$, откуда

$$\Psi_g = \exp(iHt)\Psi,$$

$$\alpha_g = \exp(iHt)\alpha\exp(-iHt).$$

Если подставить во второе соотношение $\alpha = H$, то получим $H_g = H$. Дифференцированием соотношения для α_g легко найти уравнение движения для оператора в представлении Гейзенберга:

$$i\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = [\alpha_g, H_g] = [\alpha_g, H]. \quad (2. 4)$$

Отсюда следует, что $\partial H_g/\partial t = 0$, поэтому оператор H_g можно относить к любому моменту времени.

Применяя оператор U к волновой функции стационарного состояния, легко видеть, что в этом случае Ψ_g просто совпадает с не зависящей от времени частью волновой функции $\Psi(Q)$ [см. уравнение (1. 2)].

В дальнейшем нам понадобится общее выражение для матричного элемента оператора, относящегося к стационарным состояниям системы. Речь идет о величине

$$M_{(mn)} = \langle \Psi_{g(m)} | \alpha_g | \Psi_{g(n)} \rangle,$$

где $\Psi_{g(n)}$ — собственная функция гамильтониана $H\Psi_{g(n)} = E_{(n)}\Psi_{g(n)}$. Можно без труда найти явную зависимость вели-

чины $M_{(mn)}$ от времени. С этой целью продифференцируем $M_{(mn)}$ по t с учетом уравнения (2. 4):

$$i \frac{\partial M_{(mn)}}{\partial t} = \langle \Psi_{\Gamma(m)} | \alpha_{\Gamma}, \mathbf{H} | \Psi_{\Gamma(n)} \rangle = (E_{(n)} - E_{(m)}) M_{(mn)}.$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\Gamma(m)} | \alpha_{\Gamma} | \Psi_{\Gamma(n)} \rangle &= \langle \Psi_{\Gamma(m)} | \alpha | \Psi_{\Gamma(n)} \rangle \times \\ &\times \exp [-i (E_{(n)} - E_{(m)}) t]. \end{aligned} \quad (2. 5)$$

Здесь α — оператор в представлении Шредингера.

2. 3. Частичное перенесение зависимости от времени с волновой функции на операторы приводит нас к представлению взаимодействия. Выразим гамильтониан \mathbf{H} в виде суммы $\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'$; \mathbf{H}_0 можно отождествить со свободным гамильтонианом \mathbf{H}_F , а \mathbf{H}' — с гамильтонианом взаимодействия \mathbf{H}_I (в гл. III используется иное разложение \mathbf{H} на \mathbf{H}_0 и \mathbf{H}').

Будем требовать, чтобы зависимость волновой функции от времени определялась оператором \mathbf{H}' , а эволюция операторов во времени происходила бы за счет оператора \mathbf{H}_0 . Такое представление можно считать, как показывают соответствующие формулы, гейзенберговским по отношению к \mathbf{H}_0 и шредингеровским по отношению к \mathbf{H}' . При отсутствии взаимодействия мы возвращаемся, очевидно, к представлению Гейзенберга.

Снабжая величины в представлении взаимодействия индексом «в», можно записать уравнение Шредингера в следующем виде:

$$i \frac{\partial \Psi_{\text{в}}}{\partial t} = \mathbf{H}'_{\text{в}} \Psi_{\text{в}}. \quad (2. 6)$$

Учитывая выражения (2. 1) и (2. 2) и используя уравнение (1. 1), найдем

$$i \frac{\partial U}{\partial t} = -U \mathbf{H}_0,$$

откуда

$$U = \exp (i \mathbf{H}_0 t).$$

Таким образом,

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\text{в}} &= \exp (i \mathbf{H}_0 t) \Psi, \\ \alpha_{\text{в}} &= \exp (i \mathbf{H}_0 t) \alpha \exp (-i \mathbf{H}_0 t), \\ i \frac{\partial \alpha_{\text{в}}}{\partial t} &= [\alpha_{\text{в}}, \mathbf{H}_0]. \end{aligned} \right\} \quad (2. 7)$$

Найдем далее явную зависимость от времени матричного элемента:

$$\langle \Psi_{0(m)} | \alpha_{\text{в}} | \Psi_{0(n)} \rangle$$

Повторяя рассуждения, которые привели нас к соотношению (2. 5), получим

$$\langle \Psi_{0(m)} | \alpha_b | \Psi_{0(n)} \rangle = \langle \Psi_{0(m)} | \alpha | \Psi_{0(n)} \rangle \exp [-i(E_{0(n)} - E_{0(m)}) t], \quad (2. 8)$$

где $\Psi_{0(n)}$ является решением уравнения

$$H_0 \Psi_{0(n)} = E_{0(n)} \Psi_{0(n)}.$$

Нетрудно найти и оператор перехода от представления взаимодействия к представлению Гейзенберга. Совершая промежуточный переход в представление Шредингера, получим *

$$U = \exp(iHt) \exp(-iH_0 t). \quad (2. 9)$$

Другое выражение для этого оператора дается S -матрицей (см. гл. III).

При переходе от представления Шредингера к представлениям Гейзенберга и взаимодействия полезно иметь в виду, что преобразованное произведение операторов равно произведению преобразованных сомножителей

$$Uab \dots zU^{-1} = UaU^{-1}UbU^{-1} \dots,$$

или

$$(ab \dots z)' = a'b' \dots z'. \quad (2. 10)$$

В частности, преобразуя соотношение типа $\{a, b\} = c$, где c не оператор, а обычное число — c -число, легко убедиться, что

$$\{a'(t), b'(t)\} = U(t) c U(t)^{-1} = c, \quad (2. 11)$$

где преобразованные операторы отнесены к одному и тому же моменту времени. Таким образом, соотношение рассмотренного типа (его называют перестановочным соотношением) сохраняет свой вид во всех представлениях, если относить входящие в него операторы к единому моменту времени.

2. 4. Другая возможность изменения способа описания системы связана с переходом от координат Q к новым динамическим переменным λ . Пусть $\Phi_\lambda(Q)$ — полная ортонормированная система функций, отвечающих определенным значениям этих переменных.

Разложим волновую функцию $\Psi(Q, t)$ по этой системе:

$$\Psi(Q, t) = \sum_\lambda \Psi(\lambda, t) \Phi_\lambda(Q). \quad (2. 12)$$

Коэффициент этого разложения

$$\Psi(\lambda, t) = \int dQ \Phi_\lambda^*(Q) \Psi(Q, t) \quad (2. 13)$$

* Объединение показателей в этой формуле недопустимо, так как операторы H_0 и H не коммутируют друг с другом.

играет роль волновой функции в новом представлении. В частности, квадрат его модуля дает вероятность обнаружить данное значение λ новой динамической переменной. Символ $\int dQ$ означает интегрирование по всем пространственным и суммирование по всем дискретным координатам.

Из сопоставления выражений (2.13) и (2.1) можно было бы найти явный вид соответствующего оператора перехода U . Построение преобразованного оператора α' не составило бы тогда труда. Проще, однако, исходить непосредственно из равенства (2.3), которое дает выражение для матричного элемента преобразованного оператора:

$$\langle \lambda' | \alpha' | \lambda \rangle = \int dQ \Phi_{\lambda'}^*(Q) \alpha \Phi_{\lambda}(Q). \quad (2.14)$$

2.5. В качестве новых динамических переменных можно выбрать величины, являющиеся характеристиками частиц системы — их координаты, импульсы, энергии и т. п. При этом мы имеем дело с так называемым конфигурационным представлением (в широком смысле этого термина).

Функцию $\Phi_{\lambda}(Q)$ в этом случае можно представить в виде произведения одночастичных функций $\chi_{\lambda_i}(q_i)$, каждая из которых относится к одной из частиц системы (λ_i — значение соответствующей динамической переменной i -й частицы). В частности, если переменные λ означают координаты частицы, то функция $\chi_{\lambda_i}(q_i) = \delta(q_i - q_{0i})$ является волновой функцией состояния с определенным значением координаты, равным q_{0i} . В импульсном представлении, где $\lambda_i = \vec{p}_i^*$,

$$\chi_{\vec{p}_i}(x_i) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i\vec{p}_i x_i).$$

При этом преобразованная волновая функция $\Psi(\vec{p}_1 \dots \vec{p}_N, t)$ представляет собой фурье-образ функции $\Psi(Q, t)$.

Другая возможность выбора динамических переменных приводит к важнейшему для дальнейшего представления чисел заполнения (или представлению вторичного квантования), которое будет подробно рассмотрено в следующем параграфе.

Для перехода к этому представлению необходимо задаться произвольной полной совокупностью (базисом) одночастичных волновых функций $\chi_{\lambda_1}(q), \dots, \chi_{\lambda_N}(q) \dots$, где числовой индекс указывает номер состояния в этой совокупности, а индекс λ , как и выше, показывает, собственными функциями какого оператора являются функции χ . Динамической переменной следует при этом считать не величины λ , а число частиц системы, находящихся в каждом из состояний выбранного базиса. Поскольку частицы

* Здесь для простоты опущены дискретные координаты. Ω — нормировочный объем.

системы считаются тождественными, такой подход дает полное ее описание.

Из всего сказанного следует, что изменение способа описания системы при переходе к новому представлению затрагивает разные стороны этого описания. Сюда относится прежде всего возможность изменения характера зависимости входящих в аппарат теории величин от времени. Соответственно этому различаются представления: Шредингера, Гейзенберга и представление взаимодействия.

Имеются, далее, различные возможности специализации общего характера динамических переменных. Для конфигурационного представления — это величины, являющиеся характеристиками частиц системы, для представления чисел заполнения — числа заполнения базиса.

Наконец, можно по-разному выбрать ту характеристику частицы (выше мы ее обозначали через λ), которая определяет состояние системы (в конфигурационном представлении) или базис состояний (в представлении чисел заполнения). В этом смысле различаются координатное, импульсное, энергетическое и другие представления.

Описание квантового объекта следует, таким образом, начинать с выбора определенной комбинации представлений трех перечисленных типов. В § 1, например, использована комбинация координатного и конфигурационного представлений и представления Шредингера; в гл. III будет широко применяться комбинация импульсного представления и представлений взаимодействия и чисел заполнения.

§ 3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

3. 1. В рассматриваемом представлении динамическими переменными являются числа заполнения n_ν *, определяемые числом частиц, находящихся в каждом состоянии χ_ν выбранного базиса. Последний задается выбором произвольной полной ортонормированной системы одночастичных функций $\chi_\nu(q)$ ($\nu = 1, 2 \dots$). В качестве χ_ν можно, в частности, взять систему собственных функций оператора T [см. выражение (1. 3)] с собственными значениями ε_ν

$$T\chi_\nu = \varepsilon_\nu\chi_\nu. \quad (3. 1)$$

Такой выбор отвечает, очевидно, энергетическому представлению.

Переход к новому представлению следует начать с построения системы функций $\Phi_n(Q)$ ($n = n_1, n_2 \dots$), отвечающих нахождению n_1 частиц в состоянии χ_1 , n_2 частиц — в состоянии χ_2 и т. д. Перебирая всевозможные комбинации целых чисел n_ν , удовлетворяющих условиям (речь идет о ферми-частицах) $n_\nu = 0, 1$,

* Соответственно этому мы пишем ниже $\Phi_n(Q)$ вместо $\Phi_\lambda(Q)$.

$\sum_{\nu} n_{\nu} = N$, можно прийти к следующей полной ортонормированной системе функций:

$$\Phi_n(Q) = \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} S \chi_{\nu_1}(q_1) \dots \chi_{\nu_N}(q_N), \quad (3.2)$$

где среди индексов $\nu_1 \leq \nu_2 \leq \nu_3 \dots$ имеется n_1 равных 1, n_2 равных 2 и т. д. Символ S означает антисимметризацию по координатам q .

В частности, для $N = 2$

$$\Phi_{2,0,0} \dots = \Phi_{0,2,0} \dots = 0,$$

$$\Phi_{1,1,0} \dots = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_1(q_1) \chi_2(q_2) - \chi_1(q_2) \chi_2(q_1)]$$

и т. д.

3. 2. Используя общую формулу (2. 13), легко получить выражение для волновой функции в новом представлении:

$$\Psi(n, t) = \int dQ \Phi_n^*(Q) \Psi(Q, t), \quad (3.3)$$

играющей роль амплитуды вероятности обнаружения n_1 частиц в состоянии χ_1 , n_2 частиц — в состоянии χ_2 и т. д. В частности, если в этой формуле в качестве $\Psi(Q, t)$ возьмем саму функцию $\Phi_{n_0}(Q)$ ($n_0 = n_{01}, n_{02} \dots$), то мы придем к волновой функции состояния с определенными значениями чисел заполнения, равными n_0 :

$$\Psi_{n_0}(n) = \int dQ \Phi_n^*(Q) \Phi_{n_0}(Q) = \delta_{n, n_0}. \quad (3.4)$$

Реальную волновую функцию (3. 3) всегда можно представить в виде суперпозиции функций (3. 4) с зависящими от времени коэффициентами:

$$\Psi(n, t) = \sum_{n_0} C(n_0, t) \Psi_{n_0}(n),$$

где

$$C(n_0, t) = \Psi(n_0, t).$$

Особую роль в теории играет состояние «вакуума», отвечающее полному отсутствию частиц. Волновая функция этого состояния, для которого $n_{01} = n_{02} = \dots = 0$, обозначается через $\Psi_{\text{вак}}(n)$. Как и другие функции (3. 4), отвечающие фиксированным числам заполнения, она нормирована на единицу.

3. 3. Прежде чем формулировать правила построения операторов в новом представлении (эти операторы должны действовать на функции чисел заполнения), необходимо ввести так называемые операторы уничтожения и рождения A_{ν} и A_{ν}^{\dagger} . Результат их дей-

ствия на произвольную функцию чисел заполнения определяется следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} A_v \Psi(\dots, n_v, \dots) &= (-1)^a \sqrt{1 + n_v} \Psi(\dots, n_v + 1, \dots), \\ A_v^+ \Psi(\dots, n_v, \dots) &= (-1)^a \sqrt{2 - n_v} \Psi(\dots, n_v - 1, \dots). \end{aligned} \right\} (3.5)$$

Числа заполнения n_λ с $\lambda \neq v$ вообще не меняются; показатель a равен $\sum_{\lambda=1}^{v-1} n_\lambda$.

Из приведенного определения следует, что оператор A_v играет роль оператора уничтожения, а A_v^+ — оператора рождения частицы в состоянии χ_v . В результате действия этих операторов на волновую функцию $\Psi_{n_0}(n)$ получаются выражения, пропорциональные соответственно *

$$\begin{aligned} \delta_{n_1, n_{01}} \dots \delta_{n_v+1, n_{0v}} \dots &\equiv \delta_{n_1, n_{01}} \dots \delta_{n_v, n_{0v}-1} \dots \\ \delta_{n_1, n_{01}} \dots \delta_{n_v-1, n_{0v}} \dots &\equiv \delta_{n_1, n_{01}} \dots \delta_{n_v, n_{0v}+1} \dots \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} A_v \Psi_{n_{01}, \dots, n_{0v}, \dots} &\sim \sqrt{n_{0v}} \Psi_{n_{01}, \dots, n_{0v}-1, \dots}, \\ A_v^+ \Psi_{n_{01}, \dots, n_{0v}, \dots} &\sim \sqrt{1 - n_{0v}} \Psi_{n_{01}, \dots, n_{0v}+1, \dots}. \end{aligned}$$

В частности, при действии на вакуум оператор уничтожения дает нуль:

$$A_v \Psi_{\text{вак}} = 0, \quad \Psi_{\text{вак}}^* A_v^+ = 0. \quad (3.6)$$

Второе равенство получается сопряжением первого.

Из соотношения (3.5) нетрудно получить следующие правила коммутации операторов A и A^+ :

$$\left. \begin{aligned} \{A_\mu, A_v^+\} &= \delta_{\mu v}, \\ \{A_\mu, A_v\} &= \{A_\mu^+, A_v^+\} = 0. \end{aligned} \right\} (3.7)$$

Из соотношения (3.7) получаем

$$(A_v)^2 = (A_v^+)^2 = 0.$$

С помощью введенных операторов легко связать волновую функцию $\Psi_{n_0}(n)$ с вакуумом:

$$\Psi_{n_0}(n) = (A_1^+)^{n_{01}} (A_2^+)^{n_{02}} \dots \Psi_{\text{вак}}. \quad (3.8)$$

Отсюда с учетом предыдущих равенств легко прийти к неравенству $n_{0v} \leq 1$, выражающему принцип Паули.

* Обычно операторы A и A^+ определяются по их действию не на динамическую переменную n , а на индекс состояния n_0 . Поэтому определение (3.5), отличаясь от обычного, представляется более последовательным с точки зрения общего понятия об операторе в квантовой теории.

Практически никогда не приходится пользоваться определением операторов A , A^+ . Дело сводится обычно к необходимости вычисления матричного элемента произведения таких операторов, что выполняется без труда с помощью соотношений (3. 6)—(3. 8) и условия нормировки вакуума. Так, например,

$$\langle \Psi_{\text{вак}} | A_{\nu} A_{\mu}^+ | \Psi_{\text{вак}} \rangle = \langle \Psi_{\text{вак}} | \delta_{\mu\nu} - A_{\mu}^+ A_{\nu} | \Psi_{\text{вак}} \rangle = \delta_{\mu\nu}.$$

Это относится и к операторным функциям (см. раздел 3. 4).

3. 4. Помимо операторов A_{ν} и A_{ν}^+ , отвечающих уничтожению и рождению частицы в состоянии ν , большую роль в аппарате теории играют операторные функции (или операторы поля) $\Psi(q)$ и $\Psi^+(q)$, описывающие уничтожение и рождение частицы в точке q . Эти функции определяются следующим образом:

$$\Psi(q) = \sum_{\nu} A_{\nu} \chi_{\nu}(q), \quad \Psi^+(q) = \sum_{\nu} A_{\nu}^+ \chi_{\nu}^*(q). \quad (3. 9)$$

Покажем, что в результате действия оператора $\Psi^+(q_0)$ на вакуум действительно получается состояние локализованной в точке q_0 частицы. Имеем

$$\Psi^+(q_0) \Psi_{\text{вак}} = \sum_{\nu} \chi_{\nu}^*(q_0) \delta_{n_{\nu}, 0} \dots \delta_{n_{\nu}, 1} \dots,$$

где единица отвечает занятому ν -му состоянию. Переходя в конфигурационное представление [см. выражение (2. 12)] и учитывая, что для одночастичного состояния функция $\Phi_n(Q)$ равна просто $\chi_{\nu}(q)$, с помощью условия полноты системы функций $\chi_{\nu}(q)$ найдем*

$$\Psi(Q) = \sum_{\nu} \chi_{\nu}^*(q_0) \chi_{\nu}(q) = \delta(q - q_0),$$

откуда и следует высказанное утверждение.

Пользуясь тем же условием полноты, нетрудно найти правила коммутации рассматриваемых операторов. На основе правил коммутации (3. 7) получим

$$\left. \begin{aligned} \{\Psi(q), \Psi^+(q')\} &= \delta(q - q'), \\ \{\Psi, \Psi\} &= \{\Psi^+, \Psi^+\} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (3. 10)$$

Подобно выражению (3. 6) можно написать

$$\Psi(q) \Psi_{\text{вак}} = 0, \quad \Psi_{\text{вак}}^* \Psi^+(q) = 0. \quad (3. 11)$$

3. 5. Пользуясь выражениями (3. 5), нетрудно показать, что оператор

$$n_{\nu} = A_{\nu}^+ A_{\nu} \quad (3. 12)$$

удовлетворяет соотношению

$$n_{\nu} \Psi_{n_{\nu}} = n_{0\nu} \Psi_{n_0}$$

* Здесь и ниже $\delta(q - q_0)$ означает произведение δ -функции пространственных координат и δ -символов дискретных координат.

и может быть поэтому назван оператором чисел заполнения. Операторы n_ν коммутируют друг с другом.

Оператор полного числа частиц $N = \sum_\nu n_\nu$ удовлетворяет не только соотношению $N\Psi_{n_0} = N\Psi_{n_0}$, но и более жесткому условию

$$N\Psi(n, t) = N\Psi(n, t), \quad (3.13)$$

которое связано с сохранением полного числа частиц системы. Иными словами, оператор N коммутирует с полным гамильтонианом системы.

Оператор N можно выразить и через операторы поля:

$$N = \int dq \psi^\dagger(q) \psi(q). \quad (3.14)$$

Пользуясь перестановочными соотношениями (3.10), нетрудно получить полезное соотношение

$$N\Psi(q) = \Psi(q)(N-1). \quad (3.15)$$

3. 6. Сформулируем правила построения оператора произвольной физической величины α в представлении чисел заполнения. Искомый оператор выражается через операторы рождения и уничтожения и имеет следующий простой вид:

$$\alpha' = \frac{1}{N!} \int dQ \psi^\dagger(q_N) \dots \psi^\dagger(q_1) \alpha \psi(q_1) \dots \psi(q_N). \quad (3.16)$$

Для доказательства этого достаточно, используя выражение (2.14), убедиться в выполнении равенства

$$\langle \Psi_{n_0}' | \alpha' | \Psi_{n_0} \rangle = \int dQ \Phi_{n_0}'^*(Q) \alpha \Phi_{n_0}(Q),$$

которое в свою очередь вытекает из соотношения

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \psi(q_1) \dots \psi(q_N) \Psi_{n_0} = \Phi_{n_0}(Q) \Psi_{\text{вак}}.$$

Последнее соотношение уже нетрудно доказать. В самом деле, произведение операторов ψ уничтожает все частицы, присутствующие в Ψ_{n_0} , и переводит эту функцию в вакуум. Каждый акт уничтожения сопровождается, согласно определению (3.9), появлением функции $\chi_\nu(q)$, причем получившееся произведение этих функций будет, как и исходное произведение операторов, антисимметричным. Остается убедиться в правильности численного коэффициента.

Норма правой части последнего соотношения равна единице, левой части — выражению

$$(N!)^{-1} \int dQ \langle \Psi_{n_0}' | \psi^\dagger(q_N) \dots \psi^\dagger(q_1) \psi(q_1) \dots \psi(q_N) | \Psi_{n_0} \rangle.$$

Если выделить оператор $N = \int dq_1 \psi^\dagger(q_1) \psi(q_1)$ и перенести его направо с учетом выражения (3.15), затем повторить ту же

процедуру с $N = \int dq_2 \psi^+(q_2) \psi(q_2)$ и т. д., то в результате придем к равному единице выражению:

$$(N!)^{-1} \langle \Psi_{n_0} | N(N-1) \dots | \Psi_{n_0} \rangle.$$

Если оператор α имеет n -частичную структуру

$$\alpha_n = \frac{1}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n=1}^N \alpha_{i_1 \dots i_n}, \quad (3.17)$$

где штрих означает пропуск всех слагаемых, у которых хотя бы одна пара индексов совпадает, то общую формулу (3.16) можно упростить. Для этого нужно образовать операторы N , относящиеся к аргументам, не входящим в $\alpha_{i_1 \dots i_n}$, и перенести их направо, учитывая соотношения (3.15) и (3.13). В результате получается известное выражение:

$$\alpha'_n = \frac{1}{n!} \int dq_1 \dots dq_n \psi^+(q_n) \dots \psi^+(q_1) \alpha \psi(q_1) \psi(q_n), \quad (3.18)$$

в котором уже нет суммирования по частицам.

3.7. На основе сформулированных правил нетрудно построить гамильтониан системы с парным взаимодействием в представлении чисел заполнения. Исходя из соотношений (1.3), (1.4) и учитывая выражения (3.17) и (3.18), получим

$$H = \int dq \psi^+(q) T \psi(q) + \frac{1}{2} \int dq dq' \psi^+(q) \times \\ \times \psi^+(q') V(q, q') \psi(q') \psi(q). \quad (3.19)$$

Само уравнение Шредингера в рассматриваемом представлении имеет вид

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi(n, t) = 0.$$

Гамильтониан (3.19) можно выразить и непосредственно через операторы A , A^+ . Подставив в выражение (3.19) соотношения (3.9) и введя обозначения

$$\langle \nu | T | \mu \rangle = \int dq \chi_\mu^*(q') T \chi_\nu(q),$$

$$\langle \nu \mu | V | \sigma \lambda \rangle = \int dq dq' \chi_\sigma^*(q) \chi_\lambda^*(q') V \chi_\mu(q') \chi_\nu(q),$$

получим

$$H = \sum_{\mu\nu} \langle \nu | T | \mu \rangle A_\mu^+ A_\nu + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\lambda\sigma} \langle \nu \mu | V | \sigma \lambda \rangle A_\sigma^+ A_\lambda^+ A_\mu A_\nu. \quad (3.20)$$

Если базис представления $\chi_\nu(q)$ удовлетворяет уравнению (3.1), то первое слагаемое выражения (3.20) можно записать в виде

$$H_F = \sum_\nu \epsilon_\nu n_\nu. \quad (3.21)$$

3. 8. До сих пор речь шла о системе тождественных частиц. Описание системы протонов и нейтронов в пренебрежении их электромагнитными взаимодействиями также осуществляется с помощью приведенных выше соотношений, если под q понимать пространственные, спиновую и изотопическую координаты, под v — соответствующие индексы состояния. В частности, в v должна быть включена проекция изотопического спина t ; значения $t = +1/2$ и $t = -1/2$ отвечают соответственно протонному и нейтронному состояниям.

Оператор поля $\Psi(q)$, удовлетворяющий перестановочным соотношениям (3. 10), можно выразить через операторы протонного и нейтронного полей ($\tilde{q} = \vec{x}, \sigma$):

$$\Psi(q) = \sum_v A_v \chi_v(q) = \Psi_{(p)}(\tilde{q}) \delta_{\tau, 1/2} + \Psi_{(n)}(\tilde{q}) \delta_{\tau, -1/2}. \quad (3. 22)$$

Операторы $\Psi_{(p)}$, $\Psi_{(p)}^+$, как и $\Psi_{(n)}$, $\Psi_{(n)}^+$, удовлетворяют правилам коммутации (3. 10). Что же касается операторов поля разных частиц, то они антикоммутируют друг с другом. Это обстоятельство не находится в противоречии с независимостью этих частиц (в смысле отсутствия запрета Паули), поскольку операторы физических величин, билинейные относительно Ψ и Ψ^+ , коммутируют при этом друг с другом.

Гамильтониан системы протонов и нейтронов в представлении чисел заполнения по-прежнему записывается в виде (3. 19), где под $\Psi(q)$ нужно понимать выражение (3. 22), а под V — потенциал (1. 11) (без кулоновского члена)*. Подставляя в H разложение (3. 22), можно написать

$$\begin{aligned} H = & \int d\tilde{q} \left\{ \Psi_{(p)}^+(\tilde{q}) T \Psi_{(p)}(\tilde{q}) + \Psi_{(n)}^+(\tilde{q}) T \Psi_{(n)}(\tilde{q}) \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \int d\tilde{q} d\tilde{q}' \left\{ \Psi_{(p)}^+(\tilde{q}) \Psi_{(p)}^+(\tilde{q}') V_{(pp)} \Psi_{(p)}(\tilde{q}') \Psi_{(p)}(\tilde{q}) + \right. \\ & + \Psi_{(n)}^+(\tilde{q}) \Psi_{(n)}^+(\tilde{q}') V_{(nn)} \Psi_{(n)}(\tilde{q}') \Psi_{(n)}(\tilde{q}) + \\ & + 2 \Psi_{(p)}^+(\tilde{q}) \Psi_{(n)}^+(\tilde{q}') V_{(pn)}^{(1)} \Psi_{(n)}(\tilde{q}') \Psi_{(p)}(\tilde{q}) + \\ & \left. + 2 \Psi_{(p)}^+(\tilde{q}) \Psi_{(n)}^+(\tilde{q}') V_{(pn)}^{(2)} \Psi_{(p)}(\tilde{q}') \Psi_{(n)}(\tilde{q}) \right\}. \quad (3. 23) \end{aligned}$$

Остальные члены, содержащие нечетное число индексов (p) и (n) , исчезают в силу соотношения

$$\sum_{\tau} \delta_{\tau, 1/2} \delta_{\tau, -1/2} = 0.$$

* Об учете кулоновского взаимодействия в атомном ядре см. в § 7.

Потенциалы взаимодействия между одинаковыми частицами имеют вид

$$V_{(pp)} = V_{(nn)} = V_{(c)} + V_{(a)} \frac{(1 - \mathcal{F}^{(\sigma)})}{2}. \quad (3.24)$$

Что же касается потенциала взаимодействия между протонами и нейтронами, то он состоит из двух частей. Первая

$$V_{(pn)}^{(1)} = V_{(c)} + \frac{V_{(a)}}{2} \quad (3.25)$$

не меняет вида взаимодействующих частиц, вторая

$$V_{(pn)}^{(2)} = -V_{(a)} \frac{\mathcal{F}^{(\sigma)}}{2} \quad (3.25')$$

приводит к превращению протона в нейтрон и обратно.

Таким образом, в дальнейшем в качестве гамильтониана системы будет использовано общее выражение (3.19), пригодное для описания как многоэлектронных, так и многонуклонных систем.

3. 9. Системы многих частиц в этом параграфе до сих пор рассматривались в представлении Шредингера. В дальнейшем нам понадобятся уравнения движения для операторов поля в представлении Гейзенберга. Для их получения следует воспользоваться общим соотношением (2.4), понимая под α_r величину ψ_r или ψ_r^+ и под H — гамильтониан (3.19). Заметим, что вместо H удобнее взять оператор H_r , отнесенный к тому же моменту времени t , что и рассматриваемые операторы поля. Пользуясь выражением (2.10), можно написать

$$H_r(t) = \int dq \psi_r^+(q, t) T \psi_r(q, t) + \\ + \frac{1}{2} \int dq dq' \psi_r^+(q, t) \psi_r^+(q', t) V \psi_r(q', t) \psi_r(q, t). \quad (3.26)$$

При вычислении коммутатора, входящего в соотношение (2.4), приходится сталкиваться, таким образом, только с операторами, отнесенными к одному и тому же моменту времени. Соответствующие правила коммутации совпадают с аналогичными правилами для операторов в представлении Шредингера (3.10) [см. соотношение (2.11)]:

$$\{\psi_r(q, t), \psi_r^+(q', t)\} = \delta(q - q'),$$

$$\{\psi_r(q, t), \psi_r(q', t)\} = \{\psi_r^+(q, t), \psi_r^+(q', t)\} = 0. \quad (3.27)$$

При несовпадающих временах правила коммутации имеют весьма сложный вид.

Используя далее простые тождества

$$[a, bc] = \{b, a\}c - b\{c, a\},$$

$$[a, bcde] = \{b, a\}cde - b\{c, a\}de + bc\{d, a\}e - bcd\{e, a\},$$

где a, b, c, d, e — произвольные операторы, получаем окончательно следующее уравнение в представлении Гейзенберга:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - T\right) \Psi_{\Gamma}(q, t) = \int dq' \Psi_{\Gamma}^{\dagger}(q', t) V \Psi_{\Gamma}(q', t) \Psi_{\Gamma}(q, t). \quad (3.28)$$

Аналогичное уравнение для $\Psi_{\Gamma}^{\dagger}(q, t)$ получается отсюда эрмитовым сопряжением.

ГЛАВА II

СИСТЕМЫ МНОГИХ ЧАСТИЦ В ПРИБЛИЖЕНИИ ХАРТРИ — ФОКА

§ 4. ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ — ФОКА

4. 1. Математические трудности, присущие теории многих взаимодействующих частиц, побуждают начать построение этой теории с выбора подходящего нулевого (исходного) приближения. Этот выбор должен быть подчинен следующим двум требованиям. С одной стороны, необходимо, чтобы указанное приближение было достаточно простым в математическом отношении. С другой стороны, желательно, чтобы оно как можно полнее отражало свойства реальной системы многих частиц.

Как уже отмечалось во введении, основные математические трудности теории многих взаимодействующих частиц связаны с тем, что понятие индивидуальных состояний частиц системы (в отличие от понятия состояния системы в целом) теряет свой точный смысл и может рассматриваться в лучшем случае как более или менее удачное приближение к действительности. Естественно поэтому потребовать, чтобы нулевое приближение теории многих частиц было совместимо с понятием индивидуальных состояний частиц. Для краткости приближения такого рода мы будем называть одночастичными.

Чтобы удовлетворить второму из приведенных требований, мы должны отыскать наилучшее * из одночастичных приближений. Такое приближение носит название приближения Хартри — Фока (или приближения самосогласованного поля); оно и выбирается в качестве нулевого приближения при построении теории многих частиц.

Это приближение в ряде случаев само дает достаточно точное описание системы взаимодействующих частиц.

Во всей главе используется представление Шредингера.

4. 2. Задача о построении нулевого приближения сводится к нахождению приближенного гамильтониана H_0 , заменяющего

* По поводу точного смысла термина «наилучшее приближение» см. раз-дел 4. 6.

точный гамильтониан H . Наиболее общее выражение для H_0 , отвечающее одночастичному приближению, может быть записано в виде *

$$H_0 = \int dq \psi^\dagger(q) (T + W) \psi(q) + C, \quad (4.1)$$

где C — некоторая константа; W — неизвестный пока оператор.

Оператор $T + W$ играет роль эффективного гамильтониана частицы в рассматриваемом приближении. Решение уравнения

$$(T + W) \chi_\nu(q) = \epsilon_\nu \chi_\nu(q) \quad (4.2)$$

дает волновые функции и энергии индивидуальных состояний частиц системы. При отсутствии взаимодействия оператор W обращается в нуль, а уравнение (4.2) переходит в (3.1). Явный вид оператора W и константы C будет найден ниже.

Систему функций χ_ν удобно выбрать в качестве базиса представления чисел заполнения. При этом выражение (4.1) можно переписать в виде (см. раздел 3.7)

$$H_0 = \sum_\nu \epsilon_\nu n_\nu + C, \quad (4.3)$$

где n_ν — операторы чисел заполнения. Учитывая то обстоятельство, что эти операторы коммутируют друг с другом, можно прийти к соотношению

$$[H_0, n_\nu] = 0. \quad (4.4)$$

Иными словами, числа заполнения индивидуальных уровней являются интегралами движения. Этот факт, очевидно, является выражением одночастичного характера рассматриваемого приближения.

Вводя волновую функцию Ψ_0 оператора H_0

$$H_0 \Psi_0 = E_0 \Psi_0, \quad (4.5)$$

можно переписать соотношение (4.4) в следующем виде:

$$n_\nu \Psi_0 = n_\nu \Psi_0. \quad (4.6)$$

Таким образом, волновая функция стационарного состояния системы в одночастичном приближении относится к классу функций с определенным заполнением уровней.

4.3. Рассмотрение системы многих частиц в одночастичном приближении значительно облегчается введением в аппарат теории таких величин, как матрица плотности, оператор заполнения, функция распределения. Эти величины непосредственно связаны с физическими характеристиками системы.

Одночастичная матрица плотности рассматриваемого состояния системы Ψ_0 определяется соотношением

$$R(q, q') = \langle \Psi_0 | \psi^\dagger(q') \psi(q) | \Psi_0 \rangle = \sum_\nu n_\nu \chi_\nu^*(q') \chi_\nu(q) \quad (4.7)$$

* Существуют и более сложные формы одночастичного гамильтониана. Они, однако, связаны с выражением (4.1) каноническим преобразованием.

(см. приложение А). Она дает исчерпывающую информацию об одночастичных характеристиках системы: средних значениях одночастичных операторов *, распределении плотности соответствующих величин и т. д. В частности, распределение плотности числа частиц дается равенством

$$\rho(\vec{x}) = \text{Sp}_{\sigma\tau} R(\vec{x}, \sigma, \tau; \vec{x}, \sigma', \tau'), \quad (4.8)$$

где $\text{Sp}_{\sigma\tau}$ — шпур по дискретным переменным.

Аналогичным образом можно ввести и матрицы плотности высшего порядка, описывающие двухчастичные и т. д. характеристики системы. В одночастичном приближении эти матрицы плотности сводятся к $R(q, q')$ (см. приложение А).

Матрицу плотности $R(q, q')$ можно считать матричным элементом некоторого оператора ρ (оператора заполнения). Этот матричный элемент вычисляется с помощью волновых функций $\delta(q - q_0)$, отвечающих определенному значению координаты q^{**} :

$$\begin{aligned} R(q, q') &= (q | \rho | q') = \int dq_0 \delta(q_0 - q) \rho_{q_0} \delta(q_0 - q') = \\ &= \rho_{qq} \delta(q - q'). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Разлагая δ -функцию в этом выражении по системе функций χ_v с учетом условия полноты

$$\sum_v \chi_v^*(q') \chi_v(q) = \delta(q - q')$$

и сравнивая полученное выражение с соотношением (4.7), находим

$$\rho \chi_v(q) = n_v \chi_v(q). \quad (4.9')$$

Оператор ρ , имея в качестве собственных значений числа заполнения системы, зависит, таким образом, от рассматриваемого состояния системы. Ввиду равенства $n_v^2 = n_v$ ($n_v = 0, 1$) оператор ρ удовлетворяет условию

$$\rho^2 = \rho. \quad (4.10)$$

Явный вид оператора ρ может быть найден следующим путем. Числа заполнения n_v зависят от энергии состояния ϵ_v и других величин (проекция спина, момента количества движения и т. д.), дающих вместе с энергией полное описание состояния χ_v . Огра-

* Под одночастичным мы понимаем оператор типа $\int dq \psi^+(q) a_1 \psi(q)$, имеющий в конфигурационном представлении вид $\sum_{i=1}^N a_i$. Аналогично двухчастич-

ный оператор относится к типу $\frac{1}{2} \int dq dq' \psi^+(q) \psi^+(q') a_2 \psi(q') \psi(q)$ и т. д. (см. § 3).

** Индекс у оператора означает переменную, на которую оператор действует.

начимся рассмотрением таких систем, у которых характер заполнения уровней определяется только энергией. Другими словами, предположим, что все подсостояния, отвечающие данному уровню энергии (вообще говоря, вырожденному), либо одновременно заполнены, либо одновременно свободны. Такие системы обычно называются системами с заполненными оболочками (см. § 9).

Итак, предположим, что $n_\nu = n(\epsilon_\nu)$. Учитывая уравнение (4. 2), можно написать* $n_\nu \chi_\nu = n(\epsilon_\nu) \chi_\nu = n(T + W) \chi_\nu$, откуда

$$\mathbf{q} = n(T + W). \quad (4. 11)$$

Таким образом, оператор \mathbf{q} получается при формальной замене в выражении для чисел заполнения энергии уровня ϵ_ν гамильтонианом $T + W$. Оператор \mathbf{q} , очевидно, коммутирует с $T + W$, что отвечает стационарности распределения и находится в соответствии с выражением (4. 4).

4. 4. С помощью оператора \mathbf{q} легко вычислить среднее значение одночастичного оператора $\alpha_1 = \int dq \psi^+(q) \alpha_1 \psi(q)$

$$\langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \text{Sp}(\alpha_1 \mathbf{q}). \quad (4. 12)$$

Аналогично для двухчастичного оператора

$$\alpha_2 = \frac{1}{2} \int dq dq' \psi^+(q) \psi^+(q') \alpha_2 \psi(q') \psi(q)$$

имеем

$$\langle \Psi_0 | \alpha_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \text{Sp}[\alpha_2 (1 - \mathcal{P}_{12}) \mathbf{q}_{q_1} \mathbf{q}_{q_2}]. \quad (4. 13)$$

Здесь \mathcal{P}_{12} — оператор перестановки координат (см. раздел 1. 3); Sp — шпур по всем переменным. В частности, условие нормировки имеет вид

$$\text{Sp}(\mathbf{q}) = N, \quad (4. 14)$$

где N — полное число частиц в системе. Вывод соотношений (4. 12), (4. 13) см. в приложении А. Там же даны правила вычисления шпура.

Для вычисления плотностных величин удобно ввести так называемую функцию распределения $f(\vec{x}, \vec{p})$, получающуюся при фурье-преобразовании $R(q, q')$ по разности пространственных координат $\vec{x} - \vec{x}'$:

$$R(q, q') = \int d^3 p f(\vec{x}, \vec{p}) \exp[i\vec{p}(\vec{x} - \vec{x}')]. \quad (4. 15)$$

* Функция от оператора имеет общую с ним систему собственных функций, а их собственные значения связаны тем же соотношением, что и сами операторы (см. приложение Б).

Величина $f(\vec{x}, \vec{p})$, являющаяся матрицей по дискретным переменным, будучи проинтегрирована по импульсам, дает распределение вероятности координат

$$q(\vec{x}) = \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3p f(\vec{x}, \vec{p}). \quad (4.16)$$

Аналогично распределение вероятностей импульсов дается соотношением

$$q(\vec{p}) = \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3x f(\vec{x}, \vec{p}). \quad (4.17)$$

Функцию распределения нетрудно связать с введенным выше оператором q . Подставляя в левую часть выражения (4.15) соотношение (4.9) и разлагая входящую в последнее соотношение функцию $\delta(\vec{x} - \vec{x}')$ в интеграл Фурье, находим

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \langle q \rangle_{\vec{p}}, \quad (4.18)$$

где введено обозначение *

$$\langle a \rangle_{\vec{p}} \equiv \exp(-i\vec{p}\vec{x}) a \exp(i\vec{p}\vec{x}). \quad (4.19)$$

4. 5. Простейшим из одночастичных приближений является приближение идеального газа, в котором взаимодействие между частицами игнорируется полностью. В этом случае оператор H_0 совпадает со свободным гамильтонианом H_F , а величины W и C равны нулю.

Индивидуальные волновые функции χ_v идеального газа определяются уравнением (3.1). В простейшем случае отсутствия внешнего поля решение этого уравнения можно выбрать в виде

$$\chi_v(q) = \Omega^{-1/2} \delta_{\sigma s} \delta_{\tau t} \exp(i\vec{p}\vec{x}), \quad (4.20)$$

что соответствует состоянию частицы с определенным значением импульса, проекции обычного спина s и изотопического спина t .

Энергия системы E_0 получается при усреднении гамильтониана (3.21) по состоянию Ψ_0 и имеет вид

$$E_0 = \sum_v \varepsilon_v n_v,$$

где ε_v — энергии индивидуальных уровней. Исходя из этого соотношения, нетрудно найти характеристики основного состояния системы. Минимальное значение E_0 будет, очевидно, иметь место при

$$n_v = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_v), \quad (4.21)$$

* Выбирая в качестве обкладок в этом соотношении собственные функции не оператора импульса \vec{p} , а любого другого оператора, можно прийти к функции распределения соответствующей величины [43].

где величина ϵ_F , носящая название энергии Ферми, определяет верхнюю границу заполненной части спектра и находится из условия нормировки. Функция $\theta(x)$ определяется следующим образом:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0. \end{cases}$$

Волновая функция основного состояния системы может быть записана в виде

$$\Psi_0 = (\prod_{\nu} A_{\nu}^{\dagger}) \Psi_{\text{вак}}, \quad (4.22)$$

$\epsilon_{\nu} \leq \epsilon_F$

где фигурируют операторы рождения, относящиеся ко всем заполненным уровням. Переход в этом выражении к конфигурационному представлению дает обычный детерминант Слейтера — Фока. Оператор заполнения в рассматриваемом случае, согласно выражению (4.11), может быть записан в форме

$$\mathbf{q} = \theta(\epsilon_F - T). \quad (4.23)$$

В отсутствие внешнего поля основное состояние системы характеризуется граничным импульсом p_0 , определяемым соотношением $\epsilon_F = p_0^2/2M$. Отсюда с учетом того, что $T = p^2/2M$, получим

$$\mathbf{q} = \theta(p_0^2 - p^2),$$

и функция распределения примет вид*

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \theta(p_0^2 - p^2). \quad (4.24)$$

Эта величина не зависит в данном случае от координат.

С помощью соотношения (4.16) нетрудно найти плотность числа частиц, которая определяет граничный импульс:

$$\varrho = \frac{g p_0^3}{6\pi^2}. \quad (4.25)$$

Здесь $g = \text{Sp}_{\sigma\tau}(1)$ — фактор вырождения, равный числу подсостояний с различными проекциями дискретных переменных; для электронов $g = 2$, для нуклонов $g = 4$.

Используя выражение (4.12), нетрудно найти энергию основного состояния в отсутствие внешнего поля (см. приложение А, раздел А.2):

$$E_0 = \text{Sp}(T\mathbf{q}) = \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d\vec{x} d^3p \left\langle \frac{p^2}{2M} \theta(p_0^2 - p^2) \right\rangle_{\vec{p}} = \frac{\Omega g p_0^5}{(20\pi^2 M)}.$$

* Оператор импульса \vec{p} в предыдущей формуле при действии на $\exp(i\vec{p}\vec{x})$ в выражении (4.19) превращается просто в число \vec{p} .

Своим происхождением эта величина целиком обязана принципу Паули.

Величина E_0 пропорциональна полному числу частиц $N = \Omega \rho$

и равна $E_0 = \frac{3}{5} \frac{p_0^2}{2M} N$. Отметим, что производная $\left(\frac{\partial E_0}{\partial N}\right)_\Omega$, равная химическому потенциалу системы μ , совпадает с граничной энергией Ферми:

$$\mu = \frac{p_0^2}{2M} = \varepsilon_F. \quad (4.26)$$

Это соотношение носит довольно общий характер (см. § 23).

4. 6. Наряду с приближением идеального газа существует множество других одночастичных приближений, в которых взаимодействие между частицами тем или иным способом уже принято во внимание.

Поставим вопрос о нахождении наилучшего из таких приближений; соответствующее рассмотрение приведет нас к приближению Хартри — Фока. Гамильтониан H_0 этого приближения следует искать из условия максимальной близости операторов H_0 и H , которое требует минимума нормы разности этих операторов $I = \langle \Psi_0 | (H - H_0)^2 | \Psi_0 \rangle$. Здесь Ψ_0 — волновая функция интересующего нас состояния системы в одночастичном приближении.

Формально варьируя I по H_0 , получим

$$\delta I = \langle \Psi_0 | \{H_0 - H, \delta H_0\} | \Psi_0 \rangle = 0,$$

где $\delta H_0 = \int dq \psi^\dagger(q) \delta W \psi(q) + \delta C$. Приравнивая нулю коэффициент при δC , получаем

$$\langle \Psi_0 | (H_0 - H) | \Psi_0 \rangle = 0,$$

откуда с помощью соотношений (4. 12) и (4. 13) находим

$$C = -\text{Sp}(W\mathbf{e}) + \frac{1}{2} \text{Sp}[V(1 - \mathcal{P}_{12})\mathbf{e}_{q_1}\mathbf{e}_{q_2}]. \quad (4.27)$$

Приравнивая нулю часть δI , содержащую δW , и используя выражение (4. 27) и результаты приложения А (см. раздел А. 5), можно написать

$$\text{Sp} \{ |q_1\rangle - \text{Sp}_{q_2} [V(q_1, q_2)(1 - \mathcal{P}_{12})\mathbf{e}_{q_2}] | \times \\ \times (\mathbf{e}_{q_1} - \mathbf{e}_{q_2})^2 \mathcal{P}_{13} \delta W_{q_3} \} = 0.$$

Отсюда получается искомое выражение для оператора W :

$$W_q = \text{Sp}_{q'} [V(q, q')(1 - \mathcal{P}_{qq'})\mathbf{e}_{q'}]. \quad (4.28)$$

Подставляя это выражение в соотношение (4. 27), находим

$$C = -\frac{1}{2} \text{Sp}[V(q, q')(1 - \mathcal{P}_{qq'})\mathbf{e}_q\mathbf{e}_{q'}]. \quad (4.28')$$

Этим и исчерпывается решение задачи о нахождении гамильтониана H_0 .

В дальнейшем нам понадобится выражение для оператора H_0 через матрицу плотности. Подставляя последние два соотношения в выражение (4. 1) и используя результаты приложения А (см. разделы А. 2, А. 3), найдем *

$$H_0 = \int dq \Psi^+(q) T \Psi(q) + \\ + \int_{q'' \rightarrow q'} dq dq' \Psi^+(q) V(q, q') (1 - \mathcal{F}_{qq'}) R(q', q'') \Psi(q) - \\ - \frac{1}{2} \int_{\substack{q'' \rightarrow q \\ q'' \rightarrow q'}} dq dq' V(q, q') (1 - \mathcal{F}_{qq'}) R(q, q'') R(q', q''').$$

Если потенциал V представляет собой просто функцию координат, то приведенное выражение упрощается и принимает вид

$$H_0 = \int dq \Psi^+(q) T \Psi(q) + \\ + \int dq dq' V(q, q') \{ R(q', q') \Psi^+(q) \Psi(q) - R(q, q') \Psi^+(q) \Psi(q') - \\ - \frac{1}{2} [R(q, q) R(q', q') - R(q, q') \cdot R(q', q)] \}. \quad (4. 29)$$

4. 7. Переходим к преобразованию выражения для оператора W . Обычно его записывают в виде разности $W = B - A$, где $B = \text{Sp}_{q'} [V(q, q') \mathbf{e}_{q'}]$ — оператор прямого, а $A = \text{Sp}_{q'} [V(q, q') \mathcal{F}_{qq'} \mathbf{e}_{q'}]$ — обменного самосогласованного взаимодействия.

Используя формулу (А. 20) приложения А, можно написать **

$$B = \text{Sp}_{\sigma, \tau} \int d\vec{x}' d^3 p' V \left[\vec{x} - \vec{x}', -\frac{1}{2} (\vec{p}' + \nabla_{x'}) \right] f(\vec{x}, \vec{p}' + \vec{p}). \quad (4. 30)$$

Таким образом, в общем случае оператор B является функцией оператора импульса.

Если V не зависит от оператора импульса, то [44]

$$B = \text{Sp}_{\sigma, \tau} \int d\vec{x}' d^3 p' V(q, q') f(\vec{x}', \vec{p}'). \quad (4. 30')$$

Наконец, если V является просто функцией координат, то с учетом выражения (4. 16) получается известная формула

$$B(x) = \int d\vec{x}' V(\vec{x} - \vec{x}') \mathbf{e}(\vec{x}'). \quad (4. 30'')$$

Оператор B в этом случае представляет собой просто функцию координат.

* В приводимой формуле надо сначала действовать операторами на матрицу плотности, а затем перейти к пределу $q'' \rightarrow q'$ и т. д.

** Здесь $V = V \left[\vec{x} - \vec{x}', -\frac{1}{2} (\nabla_x - \nabla_{x'}) \right]$.

Что касается оператора A , то соотношение (А. 20) дает

$$A \operatorname{Sp}_{\sigma'\tau'} \int d\vec{x}' d^3p' \exp \left[i\vec{p}' (\vec{x} - \vec{x}') \right] \mathcal{P}_{\sigma\sigma'} \mathcal{P}_{\tau\tau'} V \left[\vec{x} - \vec{x}', \right. \\ \left. \frac{1}{2} (i\vec{p}' + \nabla_x) \right] f(\vec{x}, \vec{p}' + \vec{p}). \quad (4.31)$$

Здесь ∇_x действует на функцию распределения. Если V не содержит оператора импульса, то, вводя фурье-образ потенциала по разности пространственных координат,

$$V(q, q') = \int d^3p v(\vec{p}) \exp \left[i\vec{p} (\vec{x} - \vec{x}') \right], \quad (4.32)$$

где v — матрица по дискретным переменным, получим

$$A = (2\pi)^3 \operatorname{Sp}_{\sigma'\tau'} \int d^3p' v(\vec{p}') f(\vec{x}, \vec{p}' + \vec{p}) \mathcal{P}_{\sigma\sigma'} \mathcal{P}_{\tau\tau'}. \quad (4.33)$$

Наконец, если V представляет собой просто функцию координат, то

$$A = (2\pi)^3 \int d^3p' v(\vec{p}') f(\vec{x}, \vec{p}' + \vec{p}) \quad (4.33')$$

и обязательно зависит от оператора импульса.

По поводу полученных в этом разделе соотношений нужно сделать два замечания. Во-первых, оператор импульса, входящий в функцию распределения, нужно понимать в том смысле, что при действии на плоскую волну $\exp(i\vec{p}\vec{x})$

$$f(\vec{x}, \vec{p}' + \vec{p}) \rightarrow f(\vec{x}, \vec{p}' + \vec{p}).$$

Далее, при получении соотношений (4.30'') и (4.33') была фактически использована диагональность $f(\vec{x}, \vec{p})$ относительно дискретных переменных. Это, как оказывается, свойственно системам с заполненными оболочками.

Обратимся к уравнению (4.2), описывающему индивидуальные состояния частиц. Подставляя туда соотношение (4.28) и вычисляя шпур по системе функций χ_v , найдем с учетом выражения (А.19)

$$(T + W) \chi_v(q) = \left[T + \sum_{\mu} n_{\mu} \int dq' \chi_{\mu}^*(q') V \chi_{\mu}(q') \right] \chi_v(q) - \\ - \sum_{\mu} n_{\mu} \int dq' \chi_{\mu}^*(q') V \chi_v(q') \chi_{\mu}(q) = \varepsilon_v \chi_v(q).$$

Эти уравнения представляют собой не что иное, как известные уравнения Хартри — Фока [45]*.

* Как видно из этих уравнений, член «самодействия» частицы, отвечающий $\mu = v$, автоматически из них выпадает.

Оператор W , имеющий смысл оператора эффективного взаимодействия между частицами, напоминает по своему виду потенциал внешнего поля, но зависит от рассматриваемого состояния системы*. Об этом взаимодействии говорят как о самосогласованном, имея в виду, что оператор W зависит от тех волновых функций, которые он сам же определяет. По своему физическому смыслу W отвечает усредненному потенциалу, действующему на данную частицу со стороны остальных частиц системы.

4. 8. Для нахождения выражения для функции распределения удобно использовать операторное соотношение (4. 18) [43, 46, 47]. Учитывая выражения (4. 11) и (4. 28), имеем

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \langle n(T + W) \rangle_{\vec{p}}. \quad (4. 34)$$

Совокупность соотношения (4. 34) и определений операторов T , W в выражениях (1. 3), (4. 30) — (4. 33) полностью эквивалентна уравнениям Хартри — Фока и представляет собой их операторную форму. Необходимо подчеркнуть, что простота этих соотношений иллюзорна. Дело в том, что выражение (4. 34) содержит функцию от суммы некоммутирующих операторов.

В самом деле, из правил коммутации

$$[\vec{p}, F(\vec{x})] = -i\nabla F(\vec{x})$$

следует, что операторы T , A и B попарно некоммутативны. Правила обращения с такими функциями в достаточной мере сложны (см. приложение Б). Таким образом, переход к операторной форме приводит лишь к смещению центра тяжести расчетов: вместо решения уравнения Шредингера приходится заниматься «расшифровкой» функции некоммутирующих аргументов.

В общем случае обе эти задачи в одинаковой степени сложны. Однако в применении к рассматриваемому в § 5 квазиклассическому случаю, а также при исследовании некоторых общих вопросов операторный подход имеет несомненные преимущества.

4. 9. Переходим к нахождению энергии системы в рассматриваемом приближении. Согласно выражению (4. 5) можно написать

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H_0 | \Psi_0 \rangle.$$

Учитывая соотношение (4. 3) и приведенные в приложении А соотношения (A. 14), (A. 15), имеем

$$E_0 = \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} n_{\nu} - \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} n_{\mu} n_{\nu} \langle \mu\nu | V(1 - \mathcal{F}) | \mu\nu \rangle.$$

С помощью этого выражения можно определить характер заполнения уровней в основном состоянии системы. В большин-

* Несмотря на эту зависимость, гамильтониан $T + W$ является единым для всех состояний χ_{ν} . Поэтому основные квантово-механические положения, относящиеся, в частности, к вопросам полноты и ортогональности системы функций χ_{ν} , сохраняют в данном случае свою силу.

стве случаев этому состоянию отвечает то же заполнение уровней, что и в идеальном газе *. При этом соотношения (4. 21), (4. 22) полностью сохраняют свою силу; разумеется, речь теперь идет о состояниях, определяемых уравнением (4. 2), а не (3. 1). Выражение (4. 34) принимает при этом вид

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \langle \theta(\varepsilon_F - T - W) \rangle_{\vec{p}}. \quad (4. 34')$$

Приведенное выражение для E_0 мало удобно с практической точки зрения. Используя выражения (4. 12), (4. 13), (4. 28) и (4. 28'), можно написать

$$E_0 = \text{Sp}(\varrho\tau), \quad (4. 35)$$

где $\tau = T + W/2$. Используя для вычисления шпура соотношение (A. 16') и обозначая через \mathcal{E} энергию, приходящуюся на единицу объема $\mathcal{E} = E_0/\Omega$, имеем

$$\mathcal{E} = \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3p \overline{\theta(\varepsilon_F - T - W) \tau}_{\vec{p}}, \quad (4. 36)$$

где черта означает усреднение по объему $\bar{a} = \Omega^{-1} \int d\vec{x} a$.

Представим оператор τ в следующем виде:

$$\begin{aligned} \tau &= \tau_1 + \tau_2, \\ \tau_1 &= \frac{1}{2} (T + \varepsilon_F), \\ \tau_2 &= \frac{1}{2} (T + W - \varepsilon_F). \end{aligned}$$

Часть энергии, отвечающая τ_1 , может быть с учетом выражения (4. 16) переписана в виде (U — внешнее поле)

$$\mathcal{E}_1 = \frac{1}{2} (\mathcal{E}_k + \varepsilon_F \bar{\varrho} + \bar{\varrho}U),$$

где \mathcal{E}_k — приходящаяся на единицу объема средняя кинетическая энергия:

$$\mathcal{E}_k = \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3p \frac{p^2}{2M} \overline{f(\vec{x}, \vec{p})}.$$

Энергия \mathcal{E}_2 имеет вид

$$\mathcal{E}_2 = -\frac{1}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3p \overline{\theta(\varepsilon_F - T - W) (\varepsilon_F - T - W)}_{\vec{p}}.$$

* Это утверждение носило бы абсолютный характер при отсутствии второго члена в E_0 . Однако в принципе нельзя исключить и такую возможность, когда наименьшему значению E_0 отвечает заполнение не самых низких уровней ε_0 . Для этого необходимо, чтобы соответствующее увеличение первого члена рассматриваемого выражения было скомпенсировано обратным изменением второго члена.

Формально дифференцируя это выражение по ε_F * с учетом равенств

$$\frac{\partial \theta(x)}{\partial x} = \delta(x) \quad \text{и} \quad x\delta(x) = 0,$$

находим

$$\frac{\partial \mathcal{E}_2}{\partial \varepsilon_F} = -\frac{1}{2} \bar{Q}.$$

Учитывая, далее, что \mathcal{E}_2 при $\varepsilon_F \rightarrow -\infty$ должно обращаться в нуль (частицы при этом вообще отсутствуют), находим окончательно [43]

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \left\{ \mathcal{E}_k - \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon_F \bar{Q} + \varepsilon_F \bar{Q} + \bar{Q}U \right\}. \quad (4.37)$$

Для определения полной энергии необходимо, таким образом, найти кинетическую энергию и плотность как явную функцию энергии Ферми. Выполненное преобразование позволяет избежать вычисления сложных шпуров, содержащих оператор A .

Если обменный потенциал A можно вообще не учитывать, то рассмотренная процедура позволяет избавиться и от вычисления \mathcal{E}_k . В самом деле, сравним выражение (4.37) с соотношением, вытекающим из (4.36) при $A = 0$:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_k + \bar{Q}U + \frac{1}{2} \bar{Q}B.$$

Исключая отсюда \mathcal{E}_k , найдем

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{E}_k &= - \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon_F \bar{Q} + \varepsilon_F \bar{Q} - \bar{Q}(U + B), \\ \mathcal{E} &= - \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon_F \bar{Q} + \varepsilon_F \bar{Q} - \frac{1}{2} \bar{Q}B. \end{aligned} \right\} \quad (4.38)$$

§ 5. ПРИБЛИЖЕНИЕ ТОМАСА — ФЕРМИ

5. 1. Рассмотрение реальных систем в приближении Хартри — Фока в большинстве случаев сопряжено с довольно трудоемкими численными расчетами. К тому же соответствующие уравнения в значительной мере лишены свойства универсальности; так, например, постановка однотипной задачи для двух разных атомов требует проведения двух самостоятельных расчетов.

* Дифференцирование совершается лишь по тому аргументу ε_F , от которого подынтегральное выражение зависит явным образом (кроме того, имеется и неявная зависимость W от ε_F). То же относится к интегрированию по ε_F в последующих формулах.

Положение значительно упрощается, если движение частиц под действием самосогласованного потенциала W может считаться по крайней мере в преобладающей части пространства квазиклассическим. Квазиклассическое приближение к уравнениям Хартри — Фока носит название приближения Томаса — Ферми (в широком смысле этого термина) [48, 49].

Условием квазиклассичности движения частицы является, как известно, неравенство

$$\xi = \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1, \quad (5.1)$$

где $\lambda(x)$ — квазиклассическая длина волны де Бройля частицы. Эта величина определяется следующим образом. Проведем в операторе $T + W$ формальную замену оператора импульса некоторой функцией $p(x)$ (квазиклассическим импульсом), которая определяется соотношением

$$(T + W)|_{p \rightarrow p(x)} = \epsilon_V.$$

Длина волны связана с $p(x)$ соотношением $\lambda(x) = 1/p(x)$. В частности, рассматривая основное состояние системы и полагая $\epsilon_V = \epsilon_F$, приходим к соотношению

$$(T + W)|_{p \rightarrow p_0(x)} = \epsilon_F; \quad (5.2)$$

определяемая им величина $p_0(x)$ может быть в полной аналогии со случаем однородного идеального газа названа граничным импульсом квазиклассической системы. Однако в отличие от случая однородного идеального газа эта величина оказывается функцией координат. Если W не зависит от импульса, то

$$p_0(x) = [2M(\epsilon_F - U - W)]^{1/2}.$$

Физически условие (5.1) означает, что длина волны должна быть мала по сравнению с характерными неоднородностями задачи. Иначе говоря, поскольку практически $\lambda \sim 1/p_0$, граничный импульс, а вместе с ним и эффективный потенциал должны быть слабоменяющимися функциями координат.

5.2. Если параметр ξ достаточно мал, то в нулевом приближении можно вообще пренебречь всеми градиентами граничного импульса и потенциала. Одновременно обращаются в нуль все коммутаторы слагаемых гамильтониана $T + W$. В результате выражения (4.34) и (4.34') превращаются в обычные функции; входящий в них оператор импульса действует теперь только на функцию $\exp(i\vec{p}\vec{x})$ [см. выражение (4.19)] и может быть заменен просто числом \vec{p} . Таким образом, мы приходим к следую-

щему выражению для квазиклассической функции распределения основного состояния системы*:

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \theta[\varepsilon_F - \varepsilon_{\vec{p}}(x)], \quad (5.3)$$

где $\varepsilon_{\vec{p}}(x) = (T \div W)|_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}}$ — квазиклассическое значение энергии частицы, обладающей импульсом \vec{p} .

В этом и следующем параграфах мы будем рассматривать систему только с кулоновским взаимодействием. Конкретно речь будет идти о системе электронов, следовательно, изотопические члены будут опущены. Используя соотношения (4.30'') и (4.33'), будем иметь

$$\varepsilon_{\vec{p}}(x) = \frac{p^2}{2M} \div U(\vec{x}) \div 2e^2 \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \int d^3p' f(\vec{x}', \vec{p}') - \\ - (2\pi)^3 4\pi e^2 \int \frac{d^3p'}{(p')^2} f(\vec{x}, \vec{p}' \pm \vec{p}). \quad (5.4)$$

Обычно функция $\varepsilon_{\vec{p}}$ монотонно возрастает с увеличением импульса; при этом уравнение (5.2) имеет только один корень. Используя очевидные свойства функции θ , можно написать

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \theta[p_0^2(x) - p^2]. \quad (5.3')$$

В этом выражении отчетливо проявляются квазиклассические свойства движения частиц. Действительно, функция распределения (умноженная на фактор $2/(2\pi)^3$) представляет собой по своему смыслу плотность числа частиц в фазовом (координатно-импульсном) пространстве. Как видно из последней формулы, каждая клетка фазового пространства объемом $(2\pi)^3$, относящаяся к области $p^2 < p_0^2(x)$ **, занята двумя частицами. Хорошо известно, что это характерно именно для квазиклассической системы.

С помощью полученного выражения для функции распределения нетрудно найти выражения для плотности и энергии квазиклассической системы. Используя соотношения (4.16) и (4.38), получим

$$\varrho(x) = \frac{p_0^3(x)}{3\pi^2}, \quad (5.5)$$

$$\mathcal{E}_k = \frac{p_0^5(x)}{10\pi^2 M}. \quad (5.6)$$

* Это выражение оказывается непригодным в узкой окрестности границы Ферми, относительная ширина которой порядка $\xi^{1/2}$ [50].

** В области $p^2 > p_0^2(x)$ частиц нет вообще. Заметим, что не заполнена частицами также область фазового пространства с $p_0^2(x) < 0$, как это непосредственно видно из выражения (5.3').

Для вычисления полной энергии можно применить способ, изложенный в разделе 4. 9. Исходя из соотношения

$$\int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon_F \bar{\rho} = 2 \int d^3 p \bar{\rho} (\varepsilon_F - \varepsilon_p) (\varepsilon_F - \varepsilon_p)$$

и используя выражение (5. 4), можно написать

$$\varepsilon - \varepsilon_k = \bar{\rho} U + \frac{1}{2} \bar{\rho} B - \frac{e^2}{4\pi^3} \bar{\rho}_0^2, \quad (5. 7)$$

где потенциал B дается соотношением (4. 30"). Три слагаемых в правой части выражения (5. 7) соответствуют по своему физическому смыслу энергии во внешнем поле, энергии прямого и обратного взаимодействия.

В приведенные соотношения входит неизвестная пока функция $\rho_0(x)$. Ее вид может быть получен с помощью соответствующей процедуры самосогласования. Подставляя соотношение (5. 3') в (5. 2) и используя конкретные выражения для T и W , приходим к уравнению Томаса — Ферми в интегральной форме:

$$\frac{\rho_0^2(x)}{2M} + U(x) + \frac{e^2}{3\pi^2} \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rho_0^3(x') - \frac{e^2}{\pi} \rho_0(x) = \varepsilon_F. \quad (5. 8)$$

Энергия Ферми входит в это уравнение как параметр и должна находиться из условия нормировки $\int d\vec{x} \rho(x) = N$.

5. 3. Простейшим примером квазиклассической системы является однородная система, характеристики которой (в частности, граничный импульс) не зависят от координат. Условие квазиклассичности (5. 1) выполняется при этом тривиальным образом, так как $\xi = 0$. Таким образом, в случае однородных систем никакого различия между приближениями Хартри — Фока и Томаса — Ферми не существует.

Однородные системы реализуются в тех случаях, когда внешнее поле $U(x)$ не создает выделенных в пространстве точек. Для однородных систем одноименно заряженных частиц с кулоновским взаимодействием величина $U(x)$ должна иметь вполне определенный вид и, в частности, она не может быть равна нулю.

В самом деле, подставляя $\rho_0 = \text{const}$ в соотношения (5. 4), (5. 7) и (5. 8) и полагая $U = 0$, мы сталкиваемся с появлением

расходящихся интегралов по пространству $\int \frac{d\vec{x}}{x}$. Это обстоя-

тельство отражает невозможность равновесного существования однородной (и, следовательно, безграничной в пространстве) системы одноименно заряженных частиц. Для придания рассматриваемой задаче физического смысла необходимо добавить однородный внешний фон противоположного знака заряда, нейтрализующий полный заряд системы. Потенциал

$U(x) = -e^2 \rho \int d\vec{x}' / |\vec{x} - \vec{x}'|$ (ρ — плотность числа частиц системы), создаваемый этим фоном, сам бесконечен, но с его помощью полностью устраняются расходимости в выражениях (5.4) и (5.8). При этом последнее равенство превращается просто в соотношение между константами ε_F и ρ_0 :

$$\frac{\rho_0^2}{2M} - \frac{e^2 \rho_0}{\pi} = \varepsilon_F. \quad (5.9)$$

Что же касается соотношения (5.4), то оно принимает вид

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2M} - \frac{e^2 \rho_0}{\pi} \left\{ 1 + \frac{\rho_0^2 - p^2}{2\rho\rho_0} \ln \left| \frac{p + \rho_0}{p - \rho_0} \right| \right\}. \quad (5.10)$$

Отсюда видно, что закон дисперсии частицы, т. е. зависимость между ее энергией и импульсом, за счет взаимодействия меняется. Это изменение тем меньше, чем больше импульс частицы, что соответствует уменьшению влияния взаимодействия на движение быстрой частицы. В обратном случае малых импульсов закон дисперсии также становится квадратичным. Однако истинная масса частицы M заменяется при этом некоторой эффективной массой $M_{\text{эфф}} \neq M$, в чем можно убедиться, разложив соотношение (5.10) в ряд по p . Отмеченные качественные особенности закона дисперсии носят общий характер.

Чтобы получить конечное выражение для энергии, необходимо добавить к выражению (5.7) не только энергию взаимодействия частиц с фоном, но и энергию взаимодействия фона с самим собой. Это приводит к следующему простому выражению:

$$\varepsilon = \frac{\rho_0^5}{10\pi^2 M} - \frac{e^2 \rho_0^4}{4\pi^3}. \quad (5.11)$$

Второй член этого выражения носит обменный характер*.

Совершенно очевидно, что необходимость добавления компенсирующего фона (не обязательно однородного) к бесконечно протяженным системам с кулоновским взаимодействием существует и в неоднородном случае. Практически, если речь идет, например, об электронах твердого тела, роль компенсирующего заряда играют ионы решетки (см. § 6).

Ограниченные в пространстве действием сил иной природы одноименно заряженные системы могут находиться в равновесии

* Из приведенных в этом разделе соотношений видно, что приближение Хартри — Фока для однородных систем отвечает учету членов только нулевого и первого порядков по параметру взаимодействия $(a_0 \rho_0)^{-1}$. В то же время рассмотрение неоднородной системы, например атома, в этом приближении приводит к величинам, учитывающим все степени указанного параметра. Дело в том, что в последнем случае сложной функцией величины $(a_0 \rho_0)^{-1}$ является волновая функция $\chi_v(q)$ индивидуального состояния частицы. В однородном же случае ввиду наличия трансляционной симметрии в качестве функций $\chi_v(q)$ могут быть выбраны, как и для идеального газа, плоские волны.

и при отсутствии компенсирующего заряда. Примером может служить атомное ядро.

5. 4. Перейдем к рассмотрению неоднородных систем с кулоновским взаимодействием, описываемых уравнением Томаса — Ферми (5. 8). Оценим роль последнего (обменного) члена левой части этого уравнения. Его отношение к первому имеет следующий порядок величины: $e^2 M / \rho_0 \sim (a_0 \rho_0)^{-1}$, т. е. совпадает с параметром взаимодействия (см. § 1).

Как будет показано ниже (см. раздел 5. 5), вклад по крайней мере того же порядка величины вносят поправки к уравнению Томаса — Ферми, отражающие неточность квазиклассического приближения (для краткости эти поправки будут именоваться в дальнейшем квантовыми). Поэтому, не учитывая последних, следует опустить и обменный член, что приводит к собственно уравнению Томаса — Ферми *:

$$\frac{p_0^2(x)}{2M} = \varepsilon_F - U(x) - \frac{e^2}{3\pi^2} \int \frac{dx'}{|x-x'|} \rho_0^3(x'). \quad (5. 12)$$

Действуя на обе части этого уравнения оператором Лапласа, легко получить уравнение Томаса — Ферми в дифференциальной форме:

$$\Delta p_0^2(x) = \frac{8\pi}{a_0} [\rho(x) - \sigma(x)], \quad (5. 13)$$

где $\rho(x)$ — плотность числа частиц системы (5. 5); $\sigma = \Delta U / 4\pi$ — плотность заряда источников внешнего поля (деленная на e).

5. 5. Оценим относительную роль обменных и квантовых поправок. Вклад последних определяется параметром ξ^2 (при разложении физических величин в ряд по ξ члены нечетного порядка тождественно исчезают [4]). Обменные и квантовые поправки имеют одинаковый порядок величины в том наиболее важном случае, когда область, непосредственно прилегающая к точечному источнику внешнего поля (ядру), не играет определяющей роли. Сравнивая порядки величин левой части и первого члена правой части выражения (5. 13), приходим к оценке

$$\Delta p_0^2 \sim p_0^2 / x_0^2 \sim p_0^3 / a_0,$$

откуда

$$(x_0 \rho_0)^{-2} \sim (a_0 \rho_0)^{-1}. \quad (5. 14)$$

Здесь x_0 — характерный параметр размерности длины, определяющий расстояния, на которых происходит заметное изменение ρ_0 . Левая часть выражения (5. 14), как ясно из соотноше-

* Сохранение обменных членов в квазиклассическом уравнении (5. 8) (оно носит специальное название уравнения Томаса — Ферми — Дирака) означало бы учет только части членов из числа имеющих один и тот же порядок величины. Более последовательным является рассмотрение обменных и квантовых поправок на равных началах [51].

ния (5. 1), совпадает с параметром ξ^2 , что и доказывает утверждение о совпадении порядков величин квантовой и обменной поправок.

Из соотношения (5. 14) следует, что с увеличением плотности системы вклад квантовых (и обменных) поправок уменьшается. В самом деле, подставляя в это соотношение плотность из выражения (5. 5), получим

$$\xi^2 \sim (a_0 \rho^{1/3})^{-1}. \quad (5. 14')$$

Если область вблизи ядра является по каким-либо причинам выделенной, то приведенные оценки оказываются непригодными. В этой области

$$U(r) \sim -\frac{Ze^2}{r}, \quad p_0^2(x) \sim \frac{2Z}{a_0 r},$$

где r — расстояние от ядра. Отсюда

$$\xi^2 \sim \left| \frac{\partial \left(\frac{1}{p_0} \right)}{\partial r} \right|^2 \sim \frac{a_0}{Zr},$$

$$(a_0 \rho_0)^{-1} \sim \left(\frac{r}{a_0 Z} \right)^{1/2}.$$

Таким образом, в области $r \leq a_0/Z$ квантовые поправки велики, в то время как обменные дают малый вклад.

5. 6. Малость параметра (5. 14) означает, что взаимодействие каждой пары частиц мало по сравнению с их кинетической энергией. Однако отсюда нельзя заключить, что полная энергия взаимодействия частиц системы мала по сравнению с полной кинетической энергией (см. раздел 1. 6).

Для выяснения этого вопроса оценим величину потенциала $U + V$. Каждая из частиц системы взаимодействует не со всеми остальными частицами, а лишь с частицами, расположенными от нее не далее некоторого расстояния x_1 . Для ограниченных в пространстве систем (атома, ядра) это расстояние просто совпадает с размерами системы. Если же рассматривается бесконечно протяженная система, то появляется экранировка рассматриваемой частицы, обусловленная электростатическим потенциалом компенсирующего фона; x_1 является радиусом экранированной области. Для твердого тела, например, x_1 представляет собой величину порядка расстояния между атомами решетки. Из сказанного ясно, что оценку потенциала можно получить, подставляя в его выражение длину x_1 :

$$U + V \sim e^2 \rho_0^3 x_1^2.$$

Отношение этой величины к кинетической энергии оказывается равным $\rho_0 x_1^2 / a_0 \sim (\rho_0 x_1)^2 (a_0 \rho_0)^{-1}$. Этот параметр, который и дает отношение полных энергий взаимодействия и кинетической энергии, может значительно превосходить $(a_0 \rho_0)^{-1}$. Так, в случае сжатого твердого тела $x_1 \sim Z^{1/3} / \rho_0$ и $(\rho_0 x_1)^2 \sim Z^{2/3}$; для

атома $\rho_0 \sim Z^{2/3}/a_0$, $x_1 \sim x_0 \sim a_0 Z^{-1/3}$, $(a_0 \rho_0)^{-1} \sim \xi^2 \sim Z^{-2/3}$ [49] и рассматриваемое отношение оказывается вообще величиной порядка единицы.

В однородном случае приведенные оценки теряют силу из-за того, что $x_0 \rightarrow \infty$ и уравнение (5.13) превращается в тождество $0 \equiv 0$. Ввиду полной компенсации потенциалов U и V параметр x_1 , наоборот, стремится в этом случае к нулю*. В результате остается только один параметр, характеризующий взаимодействие между частицами, именно $(a_0 \rho_0)^{-1}$.

Таким образом, кулоновское взаимодействие между частицами неоднородной системы может играть существенную роль, даже если параметр $(a_0 \rho_0)^{-1}$ мал по сравнению с единицей. Это связано с дальнедействующим характером кулоновских сил, благодаря чему при достаточно больших значениях параметра $(\rho_0 x_1)^2$ с данной частицей взаимодействует большое число других частиц.

5.7. Для выяснения пределов применимости уравнения Томаса — Ферми, а также для нахождения соответствующих поправок к этому уравнению, необходимо учесть в уравнениях Хартри—Фока члены порядка $\xi^2 \sim (a_0 \rho_0)^{-1}$. В этом приближении квантовые и обменные эффекты можно рассматривать независимо друг от друга. Начнем с обменных эффектов.

Действуя на обе части уравнения (5.8) оператором Лапласа, будем иметь

$$\Delta \rho_0^2 - \frac{8\pi}{a_0} \left(\frac{\rho_0^3}{3\pi^2} - \sigma \right) = \frac{2}{\pi a_0} \Delta \rho_0.$$

Здесь в правой части стоит обменный член, который следует считать малым. Соответственно выделим из ρ_0^2 часть, отвечающую уравнению (5.12), и обменную поправку $\rho_0^2 \rightarrow \rho_0^2 + \delta_1 \rho_0^2$. С учетом малости последней можно написать

$$\left(\Delta - \frac{4}{\pi a_0} \rho_0 \right) \delta_1 \rho_0^2 = \frac{2}{\pi a_0} \Delta \rho_0. \quad (5.15)$$

Решение этого уравнения должно быть выбрано в соответствии с условием нормировки. Другими словами, должно выполняться равенство

$$\overline{\delta_1 \rho} = \frac{1}{2\pi^2} \overline{\rho_0 \delta_1 \rho_0^2} = 0. \quad (5.16)$$

Обменная поправка к полной энергии получается заменой $\rho_0^2 \rightarrow \rho_0^2 + \delta_1 \rho_0^2$ в выражении (5.6) и в первых двух членах соотношения (5.7). Последний член соотношения (5.7), обозначен-

* Этот вывод справедлив лишь в пренебрежении корреляциями. Последние приводят к так называемому дебаевскому экранированию.

ный через \mathcal{E}_1 , имеет чисто обменную природу и должен целиком входить в обсуждаемое выражение. Таким образом,

$$\delta_1 \mathcal{E} = \frac{1}{4\pi^2 M} p_0^3 \delta_1 p_0^2 + \overline{(U + B)} \delta_1 \varrho + \mathcal{E}_1. \quad (5.17)$$

Учитывая уравнение (5.12) и условие нормировки, находим окончательно

$$\delta_1 \mathcal{E} = \mathcal{E}_1 = - \frac{e^2}{4\pi^3} \overline{p_0^4}. \quad (5.18)$$

5. 8. Переходим к определению квантовых поправок к приближению Томаса — Ферми, обусловленных неточностью квазиклассического приближения [43, 46]. Понятие о заполнении ячеек фазового пространства, лежащее по существу в основе предыдущего рассмотрения, является сугубо приближенным, поскольку при этом в значительной мере игнорируется квантово-механический принцип неопределенности. Формальным источником квантовых эффектов является, таким образом, некоммутация операторов координаты и импульса.

Рассуждения, с помощью которых было получено уравнение Томаса — Ферми (5. 8), основывались на выражении для функции распределения (5. 3). Однако это выражение неточно, поскольку при его выводе не учитывалась некоммутация операторов, входящих в точное выражение (4. 34'). Операторную функцию в выражении (4. 34') запишем в виде $\theta(\mathbf{a} + \mathbf{b})$, где $\mathbf{a} = -\mathbf{p}^2 = \Delta$; $\mathbf{b} = p_0^2(x)$; обменные члены опущены.

Фактически выражение (5. 3) представляет собой нулевой член разложения функции распределения в ряд по ξ . Члены высших порядков ведут свое происхождение от коммутаторов операторов \mathbf{a} и \mathbf{b} , причем степень ξ при каждом члене этого разложения определяется числом и структурой входящих в него коммутаторов.

Ограничиваясь членами второго порядка по ξ , следует учесть только те коммутаторы и их произведения, где содержится не более двух операций коммутирования. Действительно, при переходе к коммутаторам более сложного типа каждая новая операция коммутирования приводит к появлению минимум одного дополнительного дифференцирования функции $p_0^2(x)$, т. е. минимум одной лишней степени ξ .

В приложении Б получена общая формула для разложения произвольной функции $f(\mathbf{a} + \mathbf{b})$ в ряд по коммутаторам с нужной нам точностью [см. (Б. 17)]:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{a} + \mathbf{b}) &= f(\mathbf{a} + \mathbf{b}) - \frac{1}{2} f''(\mathbf{a} + \mathbf{b}) [\mathbf{b}, \mathbf{a}] + \\ &+ \frac{1}{6} f'''(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \{[\mathbf{b} [\mathbf{b}, \mathbf{a}]] - [\mathbf{a} [\mathbf{b}, \mathbf{a}]]\} + \\ &+ \frac{1}{8} f^{IV}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) [\mathbf{b}, \mathbf{a}]^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.19)$$

Здесь предполагается, что оператор $f(a \div b)$ действует на собственную функцию оператора a с собственным значением a . В рассматриваемом случае наблюдается именно такая ситуация — функция $\theta [p_0^2(x) - p^2]$ действует на $\exp(i\vec{p}x)$; под $a + b$ в предыдущей формуле следует понимать, таким образом, $p_0^2(x) - p^2$.

Вычисление фигурирующих в выражении (5. 19) коммутаторов дает с требуемой точностью

$$\begin{aligned} [b, a] &= -\Delta p_0^2 - 2(\nabla p_0^2) \nabla, \\ [b [b, a]] &= 2(\nabla p_0^2)^2, \\ [a [b, a]] &= -4(\nabla_i \nabla_k p_0^2) \nabla_i \nabla_k, \\ [b, a]^2 &= 4(\nabla_i p_0^2)(\nabla_k p_0^2) \nabla_i \nabla_k. \end{aligned}$$

Используя соотношение (4. 34'), приходим к следующему выражению для функции распределения с квантовыми поправками:

$$\begin{aligned} f(x, p) &= \theta(p_0^2 - p^2) \div \frac{1}{2}(\Delta p_0^2 \div 2i\vec{p}\nabla p_0^2) \delta'(p_0^2 - p^2) \div \\ &+ \frac{1}{3}[(\nabla p_0^2)^2 - 2(\vec{p}\nabla)^2 p_0^2] \delta''(p_0^2 - p^2) - \\ &- \frac{(\vec{p}\nabla p_0^2)^2}{2} \delta'''(p_0^2 - p^2). \end{aligned} \quad (5. 20)$$

5. 9. Подстановка полученного выражения в соотношение (4. 16) дает исправленное выражение для плотности числа частиц [46, 47, 51—53]:

$$\left. \begin{aligned} \varrho &= \frac{p_0^3}{3\pi^2} \div \varrho_2, \\ \varrho_2 &= -\frac{1}{96\pi^2 p_0^3} [(\nabla p_0^2)^2 - 4p_0^2 \Delta p_0^2]. \end{aligned} \right\} \quad (5. 21)$$

Выражение для кинетической энергии удобно искать на основе метода, описанного в § 4. Достаточно заметить, что, согласно выражению (5. 12), от ϵ_F зависит лишь p_0^2 (но не ∇p_0^2 , Δp_0^2 и т. д.), причем линейным образом. Поэтому интегрирование по ϵ_F выражения (5. 21) совершается элементарным путем. Применение соотношения (4. 38) приводит к следующему выражению для кинетической энергии:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_k &= \frac{\overline{p_0^5}}{10\pi^2 M} \div \epsilon_{k2}, \\ \epsilon_{k2} &= -\frac{1}{192\pi^2 M p_0} [3(\overline{\nabla p_0^2})^2 - 4\overline{p_0^2 \Delta p_0^2}]. \end{aligned} \right\} \quad (5. 22)$$

Переход в этом выражении к аргументу q с помощью соотношения (5. 21) приводит к формуле

$$\mathcal{E}_k = \frac{3}{10M} (3\pi^2)^{2/3} \overline{q^{5/3}} + \frac{1}{72M} \left(\frac{(\nabla q)^2}{q} - 6 \overline{\Delta q} \right). \quad (5. 23)$$

Второй член этого выражения совпадает по форме с известной поправкой Вейцеккера [54], но имеет в девять раз меньший коэффициент [46, 51].

Аналогичным, хотя и более громоздким, образом могут быть найдены и поправочные члены четвертого порядка по ξ . Опуская промежуточные выкладки [43, 55], приведем окончательные выражения:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_4 = & \frac{1}{30720\pi^2 p_0^9} \{ -64 p_0^6 \Delta p_0^2 + 80 p_0^4 (\Delta p_0^2)^2 + \\ & - 192 p_0^4 \nabla p_0^2 \nabla \Delta p_0^2 + 64 p_0^4 (\nabla_i \nabla_k p_0^2)^2 - 200 \Delta p_0^2 (\nabla p_0^2)^2 - \\ & - 240 p_0^2 \nabla_i \nabla_k p_0^2 \nabla_i p_0^2 \nabla_k p_0^2 + 175 (\nabla p_0^2)^4 \}. \end{aligned} \quad (5. 24)$$

Соответствующее выражение для \mathcal{E}_{k4} отличается от соотношения (5. 24) лишним множителем $p_0^2/6M$ и заменой коэффициентов в фигурных скобках соответственно на $-576, 400, 960, 320, -840, -1008, 675$.

Приведенные выражения для поправочных членов свидетельствуют о весьма быстром убывании численных коэффициентов в разложении физических величин в ряд по параметру ξ .

5. 10. Входящая в приведенные выше соотношения величина $p_0^2(x)$ не совпадает со своим квазиклассическим выражением, а сама содержит квантовые поправки. Для их нахождения подставим соотношение (5. 21) в общее выражение (5. 13), заменяя при этом $p_0^2 \rightarrow p_0^2 + \delta_2 p_0^2$:

$$\left(\Delta - \frac{4}{\pi a_0} p_0 \right) \delta_2 p_0^2 = - \frac{1}{12\pi p_0^3 a_0} [(\nabla p_0^2)^2 - 4 p_0^2 \Delta p_0^2].$$

Используя тождество

$$\frac{(\nabla p_0^2)^2}{p_0^3} \equiv \frac{2\Delta p_0^2}{p_0} - 4\Delta p_0$$

и производя замену $\Delta p_0^2 \rightarrow \frac{8}{3\pi a_0} p_0^3$ *, нетрудно убедиться в том, что между квантовой $\delta_2 p_0^2$ и обменной $\delta_1 p_0^2$ (см. раздел 5. 7) поправками к p_0^2 существует простая связь:

$$\delta_2 p_0^2 = \frac{2}{9} \delta_1 p_0^2 - \frac{1}{9\pi a_0} p_0. \quad (5. 25)$$

* Здесь опущен член $-8\pi\sigma$, поскольку он входит лишь в комбинации с p_0^{-1} . Если, как это предполагается, рассматриваются лишь точечные источники внешнего поля, эта комбинация обращается в нуль.

Квантовая поправка к плотности с учетом выражения (5. 21) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}\delta_2 \rho &= \frac{1}{2\pi^2} \rho_0 \delta_2 \rho_0^2 + \rho_2 = \\ &= \frac{1}{9\pi^2} \rho_0 \delta_1 \rho_0^2 + \frac{1}{24\pi^2} \Delta \rho_0.\end{aligned}$$

Отсюда следует, что, поскольку интеграл от последнего члена исчезает, выполнение условия (5. 16) гарантирует правильную нормировку и квантовых поправок к ρ_0^2 .

Таким образом, обменные и квантовые поправки имеют одинаковый порядок величины; более того, их зависимость от координат определяется одной и той же функцией.

В заключение найдем квантовую поправку к энергии системы. Сделаем выкладки, аналогичные произведенным в разделе 5. 7: заменим в выражении (5. 17) индексы 1 на 2, понимая под \mathcal{E}_2 величину \mathcal{E}_{k_2} из соотношения (5. 22). Учитывая уравнение Томаса — Ферми и условие нормировки, находим

$$\delta_2 \mathcal{E} = \mathcal{E}_2 - \overline{\rho_0^2} / 2M,$$

откуда

$$\delta_2 \mathcal{E} = -\frac{1}{96\pi^2 M} \left[\frac{(\nabla \rho_0^2)^2}{\rho_0} + 4\overline{\rho_0^2} \rho_0 \right]. \quad (5. 26)$$

§ 6. ПРИЛОЖЕНИЯ К ТЕОРИИ СИЛЬНОСЖАТОГО ВЕЩЕСТВА

6. 1. Рассмотренный в предыдущих параграфах аппарат может быть с успехом использован для описания ряда свойств сильносжатого вещества. Сильносжатым мы будем называть вещество, находящееся под действием столь высоких внешних давлений P , для которых удовлетворяется условие

$$P \gg \mathcal{E}_0, \quad (6. 1)$$

где \mathcal{E}_0 — величина порядка плотности энергии в несжатом веществе. Величину \mathcal{E}_0 можно истолковать также как «внутреннее» давление электронного газа в веществе, обусловленное кинетической энергией электронов. В несжатом веществе это давление компенсируется кулоновскими силами.

Вещество, находящееся под действием невысоких давлений, отличается крайним разнообразием своих свойств. Величины, характеризующие эти свойства, обнаруживают чрезвычайно резкую и немонотонную зависимость от химического состава вещества. При сжатии вещества проявляется ярко выраженная тенденция «сглаживания» его свойств, а при давлениях, удовлетворяющих условию (6. 1), эта зависимость становится сравнительно

плавной и монотонной *. Это обстоятельство существенно облегчает теоретическое рассмотрение.

В случае температуры, равной нулю, можно считать, что вещество находится в твердом (кристаллическом) состоянии [42, 56] (согласно выводам работы [42] это утверждение для сильносжатого вещества может оказаться справедливым вплоть до чрезвычайно высоких температур порядка звездных **). Отметим в этой связи, что жидкий гелий затвердевает уже при давлениях порядка десятков атмосфер.

6. 2. Величину \mathcal{E}_0 , входящую в выражение (6. 1), нетрудно оценить из следующих соображений. Обозначая энергию электрона через ε , число частиц через N и характерную длину через L , можно положить $\mathcal{E}_0 \sim N\varepsilon/L^3$.

Для простоты ограничимся рассмотрением вещества, построенного из однотипных атомов с зарядом ядра $Z \gg 1$. При этом следует различать три характерных масштаба \mathcal{E}_0 .

В периферийной области атома $\varepsilon \sim e^2/a_0$, $N \sim 1$, $L \sim a_0$, откуда соответствующая величина внутреннего давления

$$\mathcal{E}_0^{(1)} \sim \frac{e^2}{a_0^4}.$$

В центральной области атома число электронов порядка полного числа частиц $N \sim Z$, масштаб длины $L \sim a_0 Z^{-1/3}$ и энергия частицы $\varepsilon \sim p_0^2/M \sim e^2/a_0 Z^{1/3}$ (см. раздел 5. 5). Отсюда

$$\mathcal{E}_0^{(2)} \sim Z^{1/3} \frac{e^2}{a_0^4}.$$

Наконец, во внутренней области атома, размеры которой порядка радиуса К-оболочки, имеем $L \sim a_0 Z^{-1}$, $\varepsilon \sim Z^2 e^2/a_0$ и $N \sim 1$. Поэтому

$$\mathcal{E}_0^{(3)} \sim Z^5 \frac{e^2}{a_0^4}.$$

В качестве входящей в выражение (6. 1) величины \mathcal{E}_0 следует взять наименьший из рассмотренных параметров, именно $\mathcal{E}_0^{(1)}$.

* При выполнении условия (6. 1) наружные электронные оболочки атомов вещества, приводящие к отмеченной немонотонности, перестают существовать, так как входящие в их состав электроны отрываются от атомов.

** Как показывает проведенный в работе [42] анализ, плавление холодного вещества, обусловленное возрастанием амплитуды колебаний ядер $A \sim a_0 \times (R/a_0)^{3/4}$ с увеличением плотности, могло бы иметь место при $A \sim R$, где R — среднее расстояние между ядрами; $a_0 = (MZ^2 e^2)^{-1}$ — боровский радиус ядер. Соответствующие сжатия столь высоки, что еще при меньших давлениях должен начаться переход вещества в нейтронное состояние за счет захвата электронов ядрами [4].

Таким образом, нижней границей области сильносжатого вещества следует считать давления порядка $e^2/a_0^4 \sim 10^8 \text{ атм}^*$.

Область сильносжатого вещества удобно разбить на три части:

$$(I) \mathcal{E}_0^{(1)} < P < \mathcal{E}_0^{(2)}, \quad (II) \mathcal{E}_0^{(2)} < P < \mathcal{E}_0^{(3)}, \quad (III) \mathcal{E}_0^{(3)} < P.$$

В области I внешнее давление способно оторвать от атома лишь наружные электроны. Внутренние электронные оболочки уплотнены, и распределение плотности электронов в них сравнительно медленно меняется в пространстве. В области II оторвано уже подавляющее число электронов, которые в преобладающей части пространства движутся как свободные, образуя практически однородное распределение. Наконец, в области III все электроны теряют свою связь с ядрами. Вещество в этой области представляет собой построенную из ядер решетку, окруженную практически идеальным электронным газом**.

6.3. Важнейшей характеристикой сильносжатого вещества является его уравнение состояния, т. е. зависимость между его плотностью и величиной внешнего давления. Для получения этой зависимости можно воспользоваться известной формулой

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial \Omega} \right)_N, \quad (6.2)$$

где E — полная энергия системы; Ω — ее объем; N — полное число электронов. Средняя плотность последних имеет вид $\bar{\rho} = N/\Omega$.

Ввиду малости отношения массы электрона к массе ядра конфигурация решетки может считаться заданной. Соответственно поле, создаваемое ядрами, будет рассматриваться как внешнее:

$$U = -Ze^2 \sum_n \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_n|},$$

где суммирование ведется по узлам решетки. Учет колебаний последней и взаимодействия электронов с этими колебаниями в рассматриваемой области давлений сравнительно мало меняет уравнение состояния.

* К настоящему времени в лабораторных условиях достигнуты давления порядка 10^7 атм . В природе сильносжатое вещество встречается в недрах многих небесных тел. Особенно больших давлений (порядка $10^{17} - 10^{20} \text{ атм}$) можно ожидать в звездах, называемых «белые карлики».

** В дальнейшем будем рассматривать области давлений, где движение электронов можно считать нерелятивистским. Это приводит к ограничению $P \ll 10^{17} \text{ атм}$.

Полную энергию системы удобно записать в виде

$$\begin{aligned}
 E_k &= \left\langle \Psi \left| \int dq \Psi^+(q) \frac{p^2}{2M} \Psi(q) \right| \Psi \right\rangle, \\
 E - E_k &= \left\langle \Psi \left| \int dq \Psi^+(q) U \Psi(q) + \right. \right. \\
 &+ \frac{e^2}{2} \int \frac{dq dq'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \Psi^+(q) \Psi^+(q') \Psi(q') \Psi(q) \left. \left. \right| \Psi \right\rangle + \\
 &+ \frac{Z^2 e^2}{2} \sum'_{n, m} \frac{1}{|\vec{x}_n - \vec{x}_m|}.
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

Последний член в выражении для $E - E_k$ учитывает взаимодействие ядер друг с другом (за вычетом их самодействия).

Перейдем в выражении (6.3) к новым безразмерным переменным $\vec{x}' = \Omega^{-1/3} \vec{x}$. При этом из условия нормировки $\Psi(\vec{x}) = \Omega^{-1/2} \Psi(\vec{x}')$; оператор импульса $\vec{p} = -i \nabla_x = -i \Omega^{-1/3} \nabla_{x'}$. Отсюда видно, что E_k является однородной функцией Ω степени $-2/3$, $E - E_k$ — степени $-1/3$. Применяя теорему Эйлера для однородных функций $x \frac{df_n}{dx} = n f_n$ (n — степень однородности), находим окончательно

$$P = \frac{1}{3\Omega} (2E_k + E - E_k) = \frac{1}{3} (\mathcal{E} + \mathcal{E}_k). \tag{6.4}$$

Это весьма удобное соотношение позволяет находить уравнение состояния непосредственно из выражений для кинетической и полной энергии вещества.

6.4. Как будет показано в гл. IV, для описания сильносжатого вещества с достаточной точностью применимо приближение Хартри — Фока. Более того, оказывается, что выполнение условия (6.1) гарантирует также малость квантовых (а следовательно, и обменных) поправок. Чтобы убедиться в этом, достаточно оценить параметр ξ^2 [см. выражение (5.14')]. Плотность электронов ρ при выполнении условия (6.1) во всяком случае превышает величину a_0^{-3} (см. раздел 6.2), что и приводит к соотношению $\xi^2 \ll 1$. Важно в этой связи подчеркнуть что область вблизи ядра, которая требует специального рассмотрения, вносит вклад в уравнение состояния лишь при самых высоких сжатиях. Оценке в этих условиях вклада квантовых эффектов, который оказывается крайне незначительным, посвящен раздел 6.7.

Таким образом, для вывода уравнения состояния сильносжатого вещества можно использовать приближение Томаса —

Ферми. Подставляя в соотношение (6. 4) выражения (5. 6) и (5. 7) (последнее без обменного члена), получим

$$P = \frac{\bar{p}_0^5}{15\pi^2 M} - \frac{Ze^2}{3} \sum_n \frac{\bar{Q}(x)}{|\vec{x} - \vec{x}_n|} + \frac{e^2}{6} \bar{Q}\bar{B} + \frac{Z^2 e^2}{6} \sum'_{n, m} \frac{1}{|\vec{x}_n - \vec{x}_m|}; \quad (6. 5)$$

где \bar{Q} и \bar{B} даются соотношениями (5. 5) и (4. 30^а). Чтобы определить P , необходимо решить уравнение Томаса — Ферми (5. 12) для $p_0^2(x)$ с соответствующими граничными условиями.

6. 5. Особенно простое решение имеет уравнение (5. 12) в областях II и III, т. е. при выполнении условия $P \gg Z^{10/3} \frac{e^2}{a_0^4}$. Как

уже отмечалось выше, электроны при этом можно считать в основном свободными, а распределение их плотности — практически однородным.

Будем искать решение уравнения (5. 12) в виде

$$p_0^2(x) = (3\pi^2 \bar{Q})^{2/3} + \alpha(x),$$

где первый член описывает однородное распределение, а второй является малой поправкой на неоднородность. Подстановка этого выражения в уравнение (5. 12) дает

$$\alpha(x) = 2M [\delta\varepsilon_F - U(x) - B(x)],$$

где $B(x) = e^2 \bar{Q} \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$ и $\delta\varepsilon_F = \varepsilon_F - \frac{(3\pi^2 \bar{Q})^{2/3}}{2M}$. Из условия

нормировки легко найти $\delta\varepsilon_F = \bar{U} + \bar{B}$. Введем, далее, безразмерную переменную $y = (\bar{Q}/Z)^{1/3} x$, равную отношению x к среднему расстоянию между ядрами. Окончательно имеем

$$p_0^2(x) = (3\pi^2 \bar{Q})^{2/3} \left\{ 1 + \frac{2}{(3\pi^2)^{2/3}} \cdot \frac{Z^{2/3}}{a_0 \bar{Q}^{1/3}} [Q(y) - \bar{Q}] \right\}, \quad (6. 6)$$

где

$$Q(y) = \int \frac{d\vec{y}'}{|\vec{y} - \vec{y}'|} - \sum_n \frac{1}{|\vec{y} - \vec{y}_n|}.$$

Второй член в скобке в выражении (6. 6) представляет собой поправку на неоднородность и вносит вклад порядка $Z^{2/3}/(a_0 \bar{Q}^{1/3})$. Найдем уравнение состояния вещества с той же точностью. Подстановка выражения (6. 6) в первый член соотношения (6. 5) приводит просто к величине $(5M)^{-1} (3\pi^2)^{2/3} \bar{Q}^{2/3}$; поправки на неоднородность нет из-за условия нормировки. Что же касается остальных членов P , то их величина, как это будет видно из результатов, уже находится на границе принятой точности. Поэтому

для их вычисления можно использовать соотношение $\rho_0^2(x) = = (3\pi^2\bar{q})^{2/3}$, что дает после перехода к переменным y

$$\frac{e^2}{6\Omega} Z^{2/3} \bar{q}^{-1/3} \left[\int \frac{d\vec{y} d\vec{y}'}{|\vec{y} - \vec{y}'|} - 2 \sum_n \int \frac{d\vec{y}'}{|\vec{y}' - \vec{y}_n|} + \sum_{n, m} \frac{1}{|\vec{y}_n - \vec{y}_m|} \right].$$

Величина в квадратных скобках пропорциональна полному числу частиц и будет обозначена через $-\frac{6N}{Z} \theta$.

В результате получается следующее уравнение состояния:

$$P = \frac{1}{5M} (3\pi^2)^{2/3} \bar{q}^{-2/3} - \theta e^2 \bar{q}^{4/3} Z^{2/3}. \quad (6.7)$$

Коэффициент θ является безразмерной величиной порядка единицы; вычисление его требует конкретного электростатического расчета решетки. По своему физическому смыслу он близок к постоянной Маделунга ионной решетки [57].

6. 6. Возможность практического решения уравнения Томаса—Ферми в области меньших давлений сильно ограничена сложной геометрией задачи, что связано с наличием большого числа источников внешнего поля (ядер решетки). Нередко поэтому используют упрощенную модель ячеек [49, 58]*.

В этой модели вещество разбивается на нейтральные сферически-симметричные ячейки, каждая из которых содержит одно ядро. На границе ячейки ставится условие $\delta\rho_0^2(x)/\delta x = 0$, обеспечивающее ее нейтральность. В такой модели ячейки не оказывают друг на друга электростатических воздействий, и задача сводится к рассмотрению одной изолированной ячейки.

В модели ячеек не составляет труда вычислить величины Q и θ . Радиус нейтральной ячейки R определяется из условия $4\pi R^3 \bar{q}/3 = = Z$; в безразмерных единицах ему отвечает величина $\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3}$.

Несложные вычисления дают

$$Q(y) = \frac{2\pi}{3} \left[3 - \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{2/3} y^2 + 2 \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \frac{1}{y} \right], \quad (6.8)$$

где y — расстояние от центра ячейки. Константа θ имеет величину, равную

$$\theta = \frac{3}{10} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3}. \quad (6.9)$$

* Расчеты с более реалистическими моделями, справедливые в области сравнительно малых давлений, были проведены в ряде работ [59, 60].

В принятой нами модели нет возможности описать разного рода фазовые переходы, наблюдающиеся при сжатии вещества.

Приведенные результаты относились к областям II и III. Для вывода уравнения состояния вещества в области I приходится проводить численное интегрирование уравнения Томаса — Ферми. В модели ячеек это уравнение имеет вид

$$\Delta p_0^2(x) = \frac{8}{3\pi a_0} p_0^3(x)$$

с граничными условиями

$$x p_0^2(x) \Big|_0 = \frac{2Z}{a_0}, \quad \frac{\partial p_0^2(x)}{\partial x} \Big|_R = 0.$$

Такие вычисления были проведены Леттером [61]. Соответствующие результаты для железа приведены на рис. 1 (кривая 1).

6. 7. Переходим к вычислению обменных и квантовых поправок к давлению, знание которых дает возможность выявить пределы применимости квазиклассического уравнения состояния вещества*.

Начнем с вычисления квантовой поправки. Используя тождество

$$\frac{(\nabla p_0^2)^2}{p_0} = -2p_0 \Delta p_0^2 + \frac{4}{3} \Delta p_0^3$$

и уравнение (5. 13), можно привести соотношение (5. 26) к следующему виду:

$$\delta_2 \mathcal{E} = -\frac{e^2}{18\pi^3} \overline{p_0^4} + A_1 + A_2, \quad (6. 10)$$

где

$$A_1 = \frac{e^2}{6\pi} \overline{\sigma p_0}; \quad A_2 = -\frac{1}{72\pi^2 M} \overline{\Delta p_0^3}.$$

Подставляя выражение для $\sigma = Ze \sum_n \delta(\vec{x} - \vec{x}_n)$, приведем A_1 к виду $(\delta \equiv |\vec{x} - \vec{x}_n|)$:

$$A_1 = \frac{Ze^2}{6\pi\Omega} \sum_n p_0 \Big|_{\delta \rightarrow 0} = \frac{e^2 \bar{Q}}{6\pi} \left(\frac{2Z}{a_0} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{\sqrt{\delta}} + O(\sqrt{\delta}) \right].$$

* В литературе накоплен обширный численный материал по квазиклассическому уравнению состояния вещества в широкой области давления [61, 62]. Однако значительная часть этих данных обесценивается тем, что в них не учитываются квантовые эффекты, вклад которых весьма значителен.

Здесь использован тот факт, что вблизи n -го ядра $p_0^2(x) = \frac{2Z}{a_0\delta} +$
 $+$ конечные члены. Применяя теорему Гаусса, нетрудно убе-
 диться, что A_2 отличается от A_1 лишь численным коэффициентом.

Таким образом, квантовая поправка к энергии, имеющая
 низший порядок по ξ , обращается в бесконечность. Это обстоя-
 тельство будет рассматриваться в разделе 6. 8.

Поскольку эта бесконечность обусловлена лишь областью
 пространства, непосредственно прилегающей к ядрам, а эта
 область при не слишком высоких давлениях с точки зрения урав-
 нения состояния не играет роли, квантовая поправка к давлению
 может оказаться конечной величиной. В том, что это так, можно
 убедиться, если заметить, что вклад $A_{1,2}$ в давление, равный,
 согласно выражению (6. 2), $-\left(\frac{\partial(A_{1,2}\Omega)}{\partial\Omega}\right)_N$, тождественно обра-
 щается в нуль ($\bar{\rho}\Omega = N$).

Таким образом, квантовая поправка к давлению может быть
 записана в виде

$$\delta_2 P = \frac{e^2}{18\pi^3} \cdot \frac{\partial(\bar{\rho}^4 \Omega)}{\partial\Omega}. \quad (6. 11)$$

Обменную поправку к давлению нетрудно записать аналогичным
 образом, используя выражение (5. 18):

$$\delta_1 P = \frac{e^2}{4\pi^3} \cdot \frac{\partial(\bar{\rho}_0^4 \Omega)}{\partial\Omega}.$$

Это приводит нас к выводу о том, что отношение квантовой и об-
 менной поправок к давлению постоянно и равно $2/9$ [63]

$$\frac{\delta_2 P}{\delta_1 P} = \frac{2}{9}. \quad (6. 12)$$

Пользуясь этими результатами, нетрудно найти квантовую
 и обменную поправки к давлению в области II, подставляя
 вместо ρ_0 величину $(3\pi^2\bar{\rho})^{1/3}$:

$$\delta_1 P = -\frac{e^2}{4\pi} (3\pi^2)^{1/3} \bar{\rho}^{-4/3}, \quad (6. 13)$$

$$\delta_2 P = -\frac{e^2}{18\pi} (3\pi^2)^{1/3} \bar{\rho}^{-4/3}. \quad (6. 14)$$

Сравнивая эти выражения с соотношением (6. 7), легко увидеть,
 что они отличаются от поправки на неоднородность лишним
 малым фактором $Z^{-2/3}$.

6. 8. Определение обменной и квантовой поправок к давле-
 нию в области меньших давлений (в области I) удобнее произ-

водить по формуле (6. 4). Используя выражения $\delta_1 \varepsilon_k = \frac{\rho_0^3 \delta_1 \rho_0^2}{4\pi^2 M}$ и (5. 18), найдем

$$\delta_1 P = \frac{1}{12\pi^2 M} \overline{\rho_0^3 \left(\delta_1 \rho_0^2 - \frac{\rho_0}{\pi a_0} \right)}. \quad (6. 15)$$

Квантовую поправку можно определить с помощью соотношения (6. 12).

Соответствующие вычисления были проведены по модели ячеек [63, 64] *. Результаты приведены на рис. 1, заимствованном из работы [64]. Кривая 1 отвечает квазиклассическому уравнению состояния; 2 — модели Томаса — Ферми — Дирака, 3 — уравнению с квантовыми и обменными поправками. Кривая 4 построена по результатам эксперимента [65]. Все данные относятся к железу ($Z = 26$) **.

Из рисунка видно, что общая тенденция к сближению расчетных и эмпирических кривых выражена достаточно четко. В частности, отрицательный вклад обменных и квантовых поправок к давлению находится в прямом соответствии с опытом.

Вместе с тем полученные до настоящего времени давления еще недостаточно велики для того, чтобы вещество можно было считать сильносжатым в указанном в разделе 6. 1 смысле слова. При максимальных давлениях, достигнутых сейчас, квантовая и обменная поправки оказываются еще порядка самого давления.

6. 9. Остается найти квантовые и обменные поправки к давлению в области III, которой отвечает давление $P > Z^3 e^2 / a_0^4$ и плотность $\bar{\rho} > Z^3 / a_0^3$. Обменная поправка в этой области по-прежнему определяется соотношением (6. 13). Что же касается квантовой поправки, то ее вычисление требует специального рассмотрения.

В разделе 5. 5 отмечалось, что в окрестности ядер роль квантовых эффектов становится значительной. В этой области существенны квантовые поправки всех порядков по параметру ξ , отражением чего является бесконечность низшей поправки к энергии, с которой мы столкнулись в разделе 6. 7 ***.

Запишем выражение для p_0^2 в окрестности ядра в виде

$$p_0^2(x) = 2M\varepsilon_F + \frac{2Z}{a_0 \delta},$$

где δ — расстояние до ближайшего ядра; потенциал остальных ядер и электронов опущен. Граничная энергия ε_F равна с доста-

* Фактически в этих работах использовался несколько иной метод, полностью эквивалентный изложенному здесь.

** Зависимость квазиклассического давления от Z дается соотношением $P = Z^{10/3} f(\bar{\rho}/Z^2)$; зависимость квантовой и обменной поправок от Z — соотношением $\delta P = Z^{8/3} \varphi(\bar{\rho}/Z^2)$.

*** В рассматриваемой области энергия является неаналитической функцией параметра ξ , что и препятствует ее разложению в ряд по ξ .

точной точностью $(3\pi^2 \bar{\rho})^{2/3} / 2M$. Сравнивая оба выписанных члена ρ_0^2 , мы видим, что не затронутая внешним давлением область атома, где второй член преобладает, отвечает расстояниям $\delta < x_2 \equiv \frac{Z}{a_0 \bar{\rho}^{2/3}}$.

С другой стороны, нетрудно найти размеры области атома, где существенны квантовые поправки всех порядков, т. е. $\xi \geq 1$.

Исходя из определения $\xi = \frac{1}{\rho_0^3} \cdot \frac{d\rho_0^2(x)}{dx}$, находим радиус этой области

$$x^3 \sim \left(\frac{Z}{a_0 \bar{\rho}} \right)^{1/2}.$$

Непосредственно видно, что в области III

$$\frac{x_2}{x_3} \sim \left(\frac{Z^3}{a_0^3 \bar{\rho}} \right)^{1/6} < 1.$$

Таким образом, в этой области существенный вклад в давление вносит внутренняя часть атома, где нельзя ограничиться рассмотрением только квантовых поправок низшего порядка. Это обстоятельство делает невозможным использование развитого выше метода исследования квантовых эффектов.

Существует тем не менее простой способ определения квантовых поправок в области III, основанный на том, что в этой области взаимодействие электронов друг с другом и с ядрами мало по сравнению с их кинетической энергией. Это условие выполнено в области III даже в применении к наиболее сильно связанным внутренним электронам атомов.

Поэтому можно воспользоваться теорией возмущений, рассматривая $E - E_k$ в выражении (6.3) как малую поправку. Имея в виду расчеты с точностью до $(a_0 \rho_0)^{-1}$, ограничимся нижним порядком теории возмущений. С этой целью заменим в выражении (6.3) обкладки Ψ на Ψ_0 — волновую функцию идеального газа электронов. Повторяя выкладки, аналогичные проделанным в § 4, получаем

$$\mathcal{E} - \mathcal{E}_k = -3\theta e^2 \bar{\rho}^{-4/3} Z^{2/3} - \frac{e^2}{4\pi} (3\pi^2)^{1/3} \bar{\rho}^{-4/3},$$

$$\mathcal{E}_k = \frac{3}{10M} (3\pi^2)^{2/3} \bar{\rho}^{-5/3}.$$

Переходя к давлению, находим, что с точностью до $(a_0 \rho_0)^{-1}$ оно складывается из выражений (6.7) и (6.13). Член, отвечающий квантовой поправке, в рассматриваемом приближении вообще отсутствует

$$\delta_2 P = 0, \quad (6.16)$$

что отвечает компенсации квантовых поправок разного порядка по ξ .

Таким образом, полная (квантовая и обменная) поправка к давлению составляет в областях I и II $^{11}/_9\delta_1 P$ и в области III $\delta_1 P$. Последняя величина определяется соотношением (6. 15).

§ 7. ПРИЛОЖЕНИЯ К ТЕОРИИ АТОМНОГО ЯДРА

7. 1. В этом параграфе будут рассмотрены некоторые приложения развитых выше методов к теории многонуклонных систем — атомного ядра и нейтронной материи. В отличие от сильносжатого вещества приближением Хартри — Фока в данном случае ограничиться нельзя, поэтому полученные здесь результаты будут использованы в последующих главах в качестве нулевого приближения. Однако некоторые характеристики многонуклонных систем можно вычислять и в рамках приближения Хартри — Фока.

В качестве потенциала взаимодействия между нуклонами будем использовать выражение (1. 11). При этом в тех случаях, когда граничный импульс частиц p_0 удовлетворяет условию

$$p_0 c \ll 1, \quad (7. 1)$$

одновременно выполняется и условие (1. 12); это позволяет заменить потенциал $V_{(c)}$ в выражении (1. 11) псевдопотенциалом.

Функция распределения многонуклонной системы $f(\vec{x}, \vec{p})$ является матрицей относительно изотопических координат, что связано с асимметрией системы в отношении протонов и нейтронов. Ее всегда можно представить в виде

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = f_{(p)}(\vec{x}, \vec{p}) \xi_{(p)} + f_{(n)}(\vec{x}, \vec{p}) \xi_{(n)}, \quad (7. 2)$$

где $\xi_{(p, n)}$ — матрицы, выделяющие протонное и нейтронное состояния (см. раздел 1. 3); $f_{(p, n)}(\vec{x}, \vec{p})$ — функции распределения соответствующих частиц.

Подставляя это выражение в соотношения (4. 30') и (4. 33) и используя соотношение (1. 11) (без кулоновского члена), можно без труда получить следующее выражение для гамильтониана частицы:

$$T + W = T + W_{(p)} \xi_{(p)} + W_{(n)} \xi_{(n)}, \quad (7. 3)$$

где

$$W = B - A,$$

$$\left. \begin{aligned} B_{(p)} &= 2 \int d\vec{x}' d^3p' \left\{ \left(V_{(c)} + \frac{1}{4} V_{(a)} \right) f_{(p)} + \right. \\ &\quad \left. + \left(V_{(c)} + \frac{1}{2} V_{(a)} \right) f_{(n)} \right\}, \\ B_{(n)} &= 2 \int d\vec{x}' d^3p' \left\{ \left(V_{(c)} + \frac{1}{2} V_{(a)} \right) f_{(p)} + \right. \\ &\quad \left. + \left(V_{(c)} + \frac{1}{4} V_{(a)} \right) f_{(n)} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (7. 4)$$

и

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{A}_{(p)} &= \int d^3 p' \left\{ \left(v_{(c)} - \frac{1}{2} v_{(a)} \right) f_{(p)} - v_{(a)} f_{(n)} \right\}, \\ \mathbf{A}_{(n)} &= \int d^3 p' \left\{ -v_{(a)} f_{(p)} + \left(v_{(c)} - \frac{1}{2} v_{(a)} \right) f_{(n)} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (7.5)$$

В соотношениях (7.4) аргументом потенциалов является разность $\vec{x} - \vec{x}'$, аргументами функций распределения — \vec{x}' , \vec{p}' ; в соотношениях (7.5) v — фурье-образ соответствующего потенциала как функция \vec{p}' ; аргументами функций распределения являются \vec{x} , $\vec{p}' + \vec{p}$.

Само выражение для функций распределения можно получить с помощью общей формулы (4.18)*

$$f_{(i)}(\vec{x}, \vec{p}) = \langle \mathbf{q}_{(i)} \rangle_{\vec{p}}, \quad (7.6)$$

где $\mathbf{q}_{(i)} = \theta(\varepsilon_{F(i)} - T - W_{(i)})$ и $\varepsilon_{F(i)}$ — энергия Ферми протонного и нейтронного распределений, которые можно найти из соответствующих условий нормировки.

Энергию системы можно определить с помощью соотношений, приведенных в разделе 4.9. Вводя плотность кинетической энергии протонов и нейтронов

$$\mathcal{E}_{k(i)} = 2 \int d^3 p f_{(i)}(\vec{x}, \vec{p}) p^2 / 2M,$$

получим соотношения, аналогичные (4.38) (внешнее поле U считается отсутствующим):

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \mathcal{E}_{(p)} + \mathcal{E}_{(n)}, \\ \mathcal{E}_{(i)} &= \frac{1}{2} \left\{ \mathcal{E}_{k(i)} - \int_{-\infty}^{\varepsilon_{F(i)}} d\varepsilon_{F(i)} \bar{\mathbf{q}}_{(i)} + \varepsilon_{F(i)} \bar{\mathbf{q}}_{(i)} \right\}, \end{aligned} \quad (7.7)$$

где плотность числа соответствующих частиц

$$\mathcal{E}_{(i)} = 2 \int d^3 p f_{(i)}(\vec{x}, \vec{p}). \quad (7.8)$$

Остается еще учесть кулоновское взаимодействие между протонами. Соответствующий параметр взаимодействия $(a_0 \rho_0)^{-1} \sim 1/30$ (см. раздел 1.8). Отсюда следует, что нужно учитывать лишь прямое кулоновское взаимодействие, которое можно записать в виде

$$V_{\text{кул}} = 2e^2 \int \frac{d\vec{x}' d^3 p}{|\vec{x} - \vec{x}'|} f_{(p)}(\vec{x}', \vec{p}).$$

* Здесь и ниже индекс i означает p и n .

Соответствующий вклад в энергию

$$\mathcal{E}_{\text{кул}} = \frac{1}{2} \overline{\mathcal{Q}_{(p)}} B_{\text{кул}}.$$

Полученные соотношения полностью эквивалентны уравнениям Хартри — Фока для многонуклонной системы. Приближение Хартри — Фока довольно широко, хотя и в сильно упрощенной форме, применяется в теории ядра, составляя основу моделей, исходящих в той или иной форме из одночастичного описания системы нуклонов [28, 34, 66]. Потенциал $B - A$ при этом определяется не с помощью процедуры самосогласования, а подбирается полуэмпирическим способом.

7. 2. Для описания пространственно-однородного распределения нуклонов, а также достаточно тяжелых ядер можно использовать приближение Томаса — Ферми. Пренебрегая некоммутативностью операторов, входящих в выражение (7. 6), имеем

$$f_{(i)}(\vec{x}, \vec{p}) = \theta \left[\varepsilon_{F(i)} - \varepsilon_{\vec{p}(i)}(\vec{x}) \right],$$

где

$$\varepsilon_{\vec{p}(i)} = (T + W_{(i)}) \Big|_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}}.$$

Функцию распределения можно переписать и в более удобном виде:

$$f_{(i)}(\vec{x}, \vec{p}) = \theta \left[p_{0(i)}^2(x) - p^2 \right], \quad (7. 9)$$

где граничные импульсы протонного и нейтронного распределений определяются уравнениями

$$\frac{p_{0(i)}^2}{2M} + B_{(i)} - A_{(i)} \Big|_{\vec{p} \rightarrow p_{0(i)}} = \varepsilon_{F(i)}. \quad (7. 10)$$

Условие квазиклассичности требует достаточной гладкости обеих функций $p_{0(i)}^2$.

Из выражения (7. 7) нетрудно найти плотность числа частиц и кинетической энергии:

$$\mathcal{Q}_{(i)} = \frac{p_{0(i)}^3}{3\pi^2}, \quad (7. 11)$$

$$\mathcal{E}_{k(i)} = \frac{p_{0(i)}^5}{10\pi^2 M}. \quad (7. 12)$$

Полная энергия системы определяется по формуле

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E} &= \mathcal{E}_{k(p)} + \mathcal{E}_{k(n)} + \mathcal{E}_{кул} = \\
 &= \frac{1}{2} \rho_{(p)} \left(B_{(c)(p)} + \frac{1}{4} B_{(a)(p)} + B_{(c)(n)} + \frac{1}{2} B_{(a)(n)} \right) + \\
 &+ \frac{1}{2} \rho_{(n)} \left(B_{(c)(n)} + \frac{1}{4} B_{(a)(n)} + B_{(c)(p)} + \frac{1}{2} B_{(a)(p)} \right) + \\
 &+ \int d^3p d^3p' \left\{ -\overline{f_{(p)} f_{(p)}} \left(v_{(c)} - \frac{1}{2} v_{(a)} \right) - \right. \\
 &\left. - \overline{f_{(n)} f_{(n)}} \left(v_{(c)} - \frac{1}{2} v_{(a)} \right) + 2\overline{f_{(p)} f_{(n)}} v_{(a)} \right\}, \quad (7.13)
 \end{aligned}$$

где

$$B_{(a, c)(i)} = \int d\vec{x} \rho_{(i)}(\vec{x}') V_{(a, c)}(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (7.14)$$

Аргументами функций распределения в выражении (7.13) являются соответственно \vec{p} и \vec{p}' , функций v — разность $\vec{p} - \vec{p}'$.

Приведенные в этом разделе соотношения для однородных систем являются прямым следствием уравнений Хартри — Фока. Для атомных ядер эти соотношения также вытекают из уравнений Хартри — Фока, но только при условии, что массовое число A достаточно велико.

В самом деле, распределение плотности нуклонов в тяжелом ядре можно аппроксимировать следующим образом [67]. В центральной части ядра радиуса $\sim A^{1/3}$ ферми плотность практически постоянна и имеет порядок $1/\text{ферми}^3$. В сравнительно узком поверхностном слое шириной порядка 1 ферми плотность спадает до нуля. Поэтому квантовый параметр $\xi^2 \sim \frac{1}{\rho_0^4} \left(\frac{\partial \rho_0}{\partial x} \right)^2 \sim \rho_0^{-8/3} \left(\frac{\partial \rho_0}{\partial x} \right)^2$ близок к нулю в центральной части ядра и порядка единицы в поверхностном слое. Нетрудно видеть, что эффективное значение ξ^2 , усредненное по объему ядра, оказывается порядка $A^{-1/3}$. Отсюда следует, что, как и в случае атома, точность квазиклассического приближения с ростом числа частиц увеличивается.

В отличие от рассмотренных в предыдущем параграфе систем с кулоновским взаимодействием малость квантовых эффектов в рассматриваемом случае отнюдь не гарантирует малости обменных эффектов. Оценим отношение отдельных членов в выражении (7.5) к кинетической энергии ($\sim p_0^2/M$). Для члена, отвечающего потенциалу $V_{(a)}$, получаем величину порядка MV_{0i}/p_0^2 . Таким образом, как и для кулоновских систем, это отношение определяется параметром взаимодействия α (см. § 1) и потому

немало. Аналогичное отношение для потенциала $V_{(c)}$ оказывается величиной порядка cr_0 ; вклад того же порядка дает соответствующий потенциал прямого взаимодействия V . Из сказанного следует, что пренебрегать обменными членами в приведенных уравнениях нельзя. Это обстоятельство сильно осложняет решение соответствующих уравнений.

С увеличением плотности относительная роль обменного потенциала по сравнению с потенциалом прямого взаимодействия падает (для потенциала $V_{(a)}$ соответствующее отношение порядка $(ar_0)^{-3}$). Это связано с тем, что только член прямого взаимодействия учитывает эффект увеличения числа частиц, находящихся в области действия данной частицы.

7. 3. Дальнейшее использование полученных соотношений осложняется тем, что в них входят величины $\int dx V_{(c)}(\vec{x})$ и $v_{(c)}(\vec{p})$, обращающиеся для потенциала «твердой сердцевины» в бесконечность. Прямой переход к приближению Хартри — Фока для подобных потенциалов оказывается, таким образом, невозможным.

Если бы кроме потенциала $V_{(c)}$ иных взаимодействий между частицами не было, то при условии выполнения неравенства (7. 1) * указанная трудность была бы легко преодолима. Следовало бы просто заменить потенциал $V_{(c)}$ псевдопотенциалом, определяемым выражениями (1. 17)—(1. 19); тогда последующий переход к приближению Хартри — Фока не встретился бы ни с какими трудностями.

В рассматриваемом случае, однако, помимо сил отталкивания имеются также силы притяжения, описываемые потенциалом $V_{(a)}$ (кулоновские силы с интересующей нас здесь точки зрения несущественны). Возникает важный вопрос о взаимном влиянии, интерференции взаимодействий $V_{(c)}$ и $V_{(a)}$. Излагаемый ниже подход позволяет учесть главную часть этой интерференции еще в рамках приближения Хартри — Фока.

Сделаем сначала переход к этому приближению в отношении только потенциала $V_{(a)}$. Тогда возникает некоторое общее внешнее поле — общая потенциальная яма, причем, как это уже подчеркивалось в § 5, частицы в этой яме будут двигаться с измененным, неквадратичным законом дисперсии $\epsilon \vec{p} / p^2 \neq \text{const}$. При этом частицы ведут себя как твердые шары, испытывая при соприкосновении бесконечно сильное отталкивание. Нарисованная здесь физическая картина достаточно точна: переход к приближению Хартри — Фока для потенциала $V_{(a)}$ не связан с заметными ошибками (см. гл. IV).

При выводе выражения для псевдопотенциала в § 1 предполагалось, что закон дисперсии частиц квадратичен. Характеристика

* Для ядерного вещества параметр $\rho_0 c \sim 0,5$, т. е. не очень мал по сравнению с единицей. Однако соответствующий ряд обнаруживает достаточно быструю сходимость.

этого закона — масса M — явным образом входила в выражение для псевдопотенциала. Поэтому оно для наших целей более не подходит. Выразим псевдопотенциал в виде

$$V_{\text{эфф}} = \alpha \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r \right), \quad (7.15)$$

где α и β — некоторые неизвестные пока величины.

В общем случае, когда закон дисперсии $\epsilon_{\vec{p}}$ является произвольным, уравнение Шредингера в системе центра масс принимает вид

$$\left[\epsilon \left(\frac{\vec{P}}{2} - i\nabla \right) + \epsilon \left(-\frac{\vec{P}}{2} - i\nabla \right) - \epsilon \left(\frac{\vec{P}}{2} + \vec{k} \right) - \right. \\ \left. - \epsilon \left(-\frac{\vec{P}}{2} - \vec{k} \right) \right] \psi(\vec{r}) = -V(\vec{r}) \psi(\vec{r}),$$

где $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ — суммарный, а $\vec{k} = (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)/2$ — передаваемый импульс. Решение этого уравнения, заменяющего собой соотношение (1.13), таково*:

$$\psi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r}) - [\Delta\epsilon(-i\nabla) - i\delta]^{-1} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}),$$

где $\Delta\epsilon(-i\nabla)$ соответствует выражению в квадратных скобках в предыдущем соотношении.

Подставим сюда вместо V псевдопотенциал (7.15) и обозначим через γ значение величины $\left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r \right) \psi$ при $r = 0$. Ограничиваясь рассмотрением s -состояния, можно написать**

$$\psi(r) = \frac{\sin kr}{kr} - \alpha\gamma \int \frac{d^3p \sin pr}{pr [\Delta\epsilon(\vec{p}) - i\delta]}.$$

Выделим, далее, из $[\Delta\epsilon(\vec{p}) - i\delta]^{-1}$ величину $M(p^2 - \tilde{k}^2 - i\delta)^{-1}$ (импульс \tilde{k} будет определен ниже). Тогда входящий в последнюю формулу интеграл может быть записан при малых r в виде:

$$\frac{M}{4\pi r} (1 + i\tilde{k}r) + I,$$

где

$$I = \int d^3p \left(\frac{1}{\Delta\epsilon(\vec{p}) - i\delta} - \frac{M}{p^2 - \tilde{k}^2 - i\delta} \right).$$

* Выражения типа $(a \pm i\delta)^{-1}$ исследуются в приложении В.

** Это выражение получается разложением δ -функции (7.15) в интеграл Фурье и выделением нулевой сферической гармоники в экспонентах $\exp(i\vec{k}\vec{r})$, $\exp(i\vec{p}\vec{r})$.

Сходимость I обеспечена тем, что при $p \rightarrow \infty$, $\varepsilon_{\vec{p}} \rightarrow \frac{p^2}{2M}$.

Параметр β удобно выбрать равным $\frac{4\pi}{M} I$. Тогда, вычисляя величину $(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r) \psi$ при $r = 0$, получим соотношение

$$\gamma = \left(1 + \alpha \gamma \frac{i\tilde{k}M}{4\pi}\right)^{-1}.$$

До сих пор рассмотрение велось в самом общем виде и специфика исходного потенциала V никак не была использована. Потребуем теперь, чтобы в точке $r = c$ функция $\psi(r)$ обращалась в нуль; это соответствует бесконечному отталкиванию в указанной точке. Тогда для параметра α получится следующее выражение:

$$\alpha^{-1} = \frac{kc}{\sin kc} \int \frac{d^3p \sin pc}{pc [\Delta\varepsilon(\vec{p}) - i\delta]} - \frac{Mi\tilde{k}}{4\pi}.$$

Выберем величину \tilde{k} следующим образом:

$$\frac{Mi\tilde{k}}{4\pi} = -\frac{i\pi kc}{\sin(kc)} \int d^3p \frac{\sin pc}{pc} \delta[\Delta\varepsilon(\vec{p})].$$

Тогда, используя общее соотношение $(a - i\delta)^{-1} = Pa^{-1} + i\pi\delta(a)$, найдем

$$\alpha^{-1} = \frac{kc}{\sin kc} P \int \frac{d^3p \sin pc}{pc \Delta\varepsilon(\vec{p})},$$

где символ $P \int d^3p$ означает интеграл в смысле главного значения (см. приложение В).

Полученные результаты можно суммировать следующим образом. В случае неквадратичного закона дисперсии (стремящегося, однако, к квадратичному при высоких импульсах) псевдопотенциал определяется выражением ($kc \ll 1$)

$$V_{\text{эфф}} = \frac{4\pi c}{M_{\text{эфф}}} \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r\right), \quad (7.16)$$

где *

$$M_{\text{эфф}} = 4\pi P \int \frac{d^3p}{p} \cdot \frac{\sin pc}{\Delta\varepsilon(\vec{p})},$$

$$\beta = -\frac{4\pi}{M} \int d^3p \left(\frac{1}{\Delta\varepsilon(\vec{p})} - \frac{M}{p^2 - k^2} \right).$$

* Величина $M_{\text{эфф}}$ очень слабо зависит от \vec{p} и \vec{k} [38], но заметным образом меняется при изменении ρ_0 .

Очевидно, что при $\varepsilon(p) = p^2/2M$ мы возвращаемся к результатам, полученным в § 1. В частности, при этом $\alpha = 4\pi c/M$, $\beta = 0$, $\tilde{k} = k$.

Заметим, что в то время как при $\varepsilon = p^2/2M$ имело место равенство *

$$\delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} \right) P \int \frac{d^3 p}{pr} \cdot \frac{\sin pr}{p^2 - k^2} = 0,$$

в общем случае

$$\delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r \right) P \int \frac{d^3 p}{pr} \cdot \frac{\sin pr}{\Delta \varepsilon(p)} = 0.$$

Этим мы воспользуемся в § 18.

С одной стороны, функция $\varepsilon(p)$ при $p \gg p_0$ стремится к $p^2/2M$ — закону дисперсии свободной частицы. С другой стороны, столкновению шаров отвечают малые расстояния $r \sim c$ и, следовательно, большие импульсы $p \sim \frac{1}{c} \gg p_0$. Поэтому разница между $M_{\text{эфф}}$ и M является величиной высшего (первого) порядка малости по параметру $p_0 c$. Следовательно, неквадратичностью закона дисперсии нуклонов при рассмотрении p -рассеяния и других членов высшего порядка можно пренебречь.

Далее, мы будем опускать члены порядка $(cp_0)^3$, которые будут рассмотрены в § 18 наряду с корреляционными членами.

7. 4. В этом разделе мы рассмотрим некоторые свойства однородных моделей ядерного вещества так называемых ядерной и нейтронной материй.

Ядерной материей называется бесконечная однородная система протонов и нейтронов, представленных с одинаковой плотностью. Кулоновские силы при этом по необходимости считаются отсутствующими (см. раздел 5. 3). В этой модели не учитываются следующие особенности реальных ядер: кулоновское взаимодействие, поверхностные эффекты, неравенство чисел протонов и нейтронов.

Модель ядерной материи в некоторой степени пригодна для описания вещества в сердцевине тяжелых атомных ядер. Рассматриваемая модель, несмотря на свою грубость, играет большую роль в микроскопической теории ядра, будучи составной частью и пробным камнем различных вариантов теории **.

Полагая в приведенных выше соотношениях $\varepsilon_{F(p)} = \varepsilon_{F(n)}$ и соответственно $f_{(p)} = f_{(n)}$, нетрудно получить закон диспер-

* Фигурирующий здесь интеграл пропорционален $\cos kr/kr$.

** Современный обзор теории ядерной материи содержится в работе [68].

сии $\varepsilon_{\vec{p}}$ и энергию ядерной материи. Прежде всего с помощью выражений (7. 3)—(7. 5) имеем

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2M} + \frac{p_0^3}{3\pi^2} \int d\vec{\xi} \left(2V_{(c)} + \frac{3}{4}V_{(a)} \right) - \int d^3p' f(\vec{x}, \vec{p}') \left(v_{(c)} - \frac{3}{2}v_{(a)} \right), \quad (7. 17)$$

где $\vec{\xi} = \vec{x} - \vec{x}'$. Это выражение удобно представить в виде

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \int_0^p \frac{dpp}{M_0(p)} + V(p_0), \quad (7. 18)$$

где $M_0(p) = \left[\frac{1}{p} \cdot \frac{\partial \varepsilon_{\vec{p}}}{\partial p} \right]^{-1}$ — эффективная масса.

Несложные вычисления дают *

$$\left. \begin{aligned} \frac{M}{M_0(p)} &= 1 + \frac{3\pi}{4} \cdot \frac{a^2}{(a-c)^2} \varphi(p, p_0), \\ \varphi(p, p_0) &= \frac{1}{x} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\sin x}{x} \right) \sin y - \frac{1}{2x} \left[\frac{\sin(x+y)}{(x+y)} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sin(x-y)}{(x-y)} \right], \end{aligned} \right\} \quad (7. 19)$$

$$V(p_0) = -\frac{\pi}{12M(a-c)^2} [y^3 + 9 \text{Si}(y) - 9 \sin y] + \frac{2cp_0^3}{\pi M_{\text{эфф}}}, \quad (7. 20)$$

где $x = ap$; $y = ap_0$.

Здесь и ниже входит интегральный синус $\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt$.

Первый член выражения (7. 18), представленный на рис. 2, удобно аппроксимировать следующим образом:

$$\int_0^p \frac{dpp}{M_0(p)} = \frac{p^2}{2M} + \left\{ \begin{aligned} \frac{p^2}{2M} \mu & \quad p < \lambda p_0 \\ \frac{p_0^2}{2M} \lambda^2 \mu & \quad p > \lambda p_0, \end{aligned} \right\} \quad (7. 21)$$

где $\lambda(p_0)$ и $\mu(p_0)$ подбираются методом наименьших квадратов [38]. Для реального значения $p_0 = 1,4 \text{ ферми}^{-1}$ имеем $\mu = 0,75$, $\lambda = 1,3$, $\frac{M_{\text{эфф}}}{M} = 0,7$. Таким образом, для нуклонов, лежащих ниже границы Ферми, эффективная масса оказывается равной $M_0 \approx 0,57M$. Из полуэмпирических соображений обычно выбирают $M_0 = 0,5M$.

* Вместо $V_{(c)}$ подставляем выражение (7. 16) в низшем порядке по c . В рассматриваемом приближении оператор $1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r$ можно заменить единицей.

Энергия ядерной материи может быть вычислена с помощью выражений (7. 12) — (7. 14) (напоминаем, что в рассматриваемом случае $f_{(p)} = f_{(n)}$, $q_{(p)} = q_{(n)}$, $e^2 = 0$); она оказывается пропорциональной массовому числу A *:

$$E = \frac{3}{10} \frac{\rho_0^2}{M} A \left\{ 1 + \frac{10}{3\pi} \frac{M}{M_{\text{эфф}}} c\rho_0 - \frac{5\pi}{36} \frac{a^2}{(a-c)^2} \cdot \varphi_1(y) \right\}, \quad (7. 22)$$

$$\varphi_1(y) = y + \frac{9}{y^2} \text{Si}(2y) - \frac{9}{2y^3} (3 - \cos 2y) + O(y^{-4}).$$

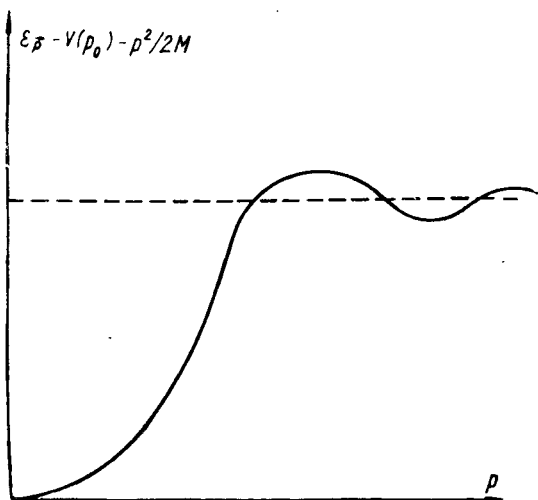


Рис. 2

При выводе этого выражения использован псевдопотенциал, вследствие чего оно непригодно при не слишком малых значениях $c\rho_0$.

В последнее время появился интерес к другой модели ядерного вещества — так называемой нейтронной материи, представляющей собой бесконечную однородную совокупность нейтронов [40, 69].

Подставляя в соотношения разделов 7. 1, 7. 2 $\varepsilon_{F(p)} = -\infty$, $f_{(p)} = 0$, $q_{(p)} = 0$, найдем для закона дисперсии нейтронов следующее выражение:

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2M} + \frac{\rho_0^3}{3\pi^2} \int d\vec{\xi} \left(V(c) + \frac{1}{4} V(a) \right) - \int d^3p' f(\vec{x}, \vec{p}') \left(v(c) - \frac{1}{2} v(a) \right).$$

* Численно при $\rho_0 = 1,4$ ферми⁻¹ $y = 3,22$ и $\varphi_1(y) = 4,20$.

Сравнивая это выражение с аналогичным выражением для ядерной материи, нетрудно заметить, что величины $\frac{M}{M_0} - 1$ и $V(\rho_0)$ для нейтронной материи втрое меньше, чем для ядерной.

Энергию нейтронной материи можно найти из выражений (7. 12)—(7. 14):

$$E = \frac{3}{10} \cdot \frac{\rho_0^2}{M} N \left\{ 1 + \frac{10}{9\pi} \cdot \frac{M}{M_{\text{эфф}}} c\rho_0 - \frac{5\pi}{108} \cdot \frac{a^2}{(a-c)^2} \cdot \Phi_1(y) \right\}, \quad (7. 23)$$

где N — полное число нейтронов. Вклад двух последних членов фигурной скобки, ответственных за взаимодействие, в частности за притяжение между нуклонами, также втрое меньше, чем в аналогичном выражении (7. 22). Это обстоятельство делает особенно острым для нейтронной материи вопрос о возможности ее существования в связанном (жидком) состоянии.

7. 5. Решение уравнения Томаса — Ферми для реального неоднородного ядра оказывается очень трудным из-за необходимости учета обменных членов [44]. Поэтому целесообразно применить прямой вариационный метод. С этой целью необходимо задаться некоторой пробной функцией $q_{(p, n)}(x)$, содержащей ряд вариационных параметров, подставить эту функцию в выражение для полной энергии системы и провести варьирование его по этим параметрам. По вычисленным значениям вариационных параметров, обеспечивающим минимум энергии, можно найти как распределение частиц, так и саму величину энергии системы [70, 71].

В качестве пробных функций возьмем следующее выражение:

$$q_{(p, n)}(x) = q_{(p, n)}^{(0)} \begin{cases} 1 & x < R - \frac{d}{2} \\ \frac{R + \frac{d}{2} - x}{d} & R - \frac{d}{2} < x < R + \frac{d}{2} \\ 0 & x > R + \frac{d}{2} \end{cases} \quad (7. 24)$$

Такое трапециевидное распределение плотности находится в близком соответствии с опытом*. Для простоты положено, что средний радиус распределения R и ширина поверхностного слоя d одинаковы для протонного и нейтронного распределений. Постоянные $q_{(p, n)}^{(0)}$ нетрудно найти из условия нормировки

$$q_{(p)}^{(0)} = \frac{3Z}{4\pi R^3} \left[1 + O\left(\frac{d^2}{R^2}\right) \right] \quad q_{(n)}^{(0)} = \frac{3(A-Z)}{4\pi R^3} \left[1 + O\left(\frac{d^2}{R^2}\right) \right].$$

* Такой выбор может дать, естественно, лишь относительный минимум энергии. В работе [72], которой мы следуем, приведены аргументы в пользу выбранного распределения плотности.

Выбранная пробная функция содержит при заданном A три вариационных параметра. Во-первых, это заряд ядра Z , который сравнительно мало отличается от $A/2$. Введем малый параметр $\sigma = (A - 2Z)/A$, определяющий относительный избыток нейтронов в ядре, и будем в дальнейшем разлагать энергию до членов σ^2 включительно.

Вторым вариационным параметром является ширина поверхностного слоя d . Эта величина не зависит от A и может считаться малой по сравнению с $R \sim A^{1/3}$ (но не с радиусом действия ядерных сил). В дальнейшем ограничимся учетом членов не выше первого порядка по d/R . Одновременно будем пренебрегать перекрестными членами типа $\sigma d/R$, $\sigma^2 d/R$ и т. д.

Наконец, третьим вариационным параметром является сам радиус распределения R (или однозначно связанный с ним граничный импульс p_0). В приближении Хартри — Фока энергия как функция R не имеет минимума (см. раздел 7. 7). Поэтому здесь мы не будем считать R вариационным параметром, а подставим его эмпирическое значение $R \approx 1,1 A^{1/3}$ ферми (соответствующее значение $p_0 = 1,4$ ферми $^{-1}$). Подстановка выражения (7. 24) в соотношения (7. 12)—(7. 14) с учетом перечисленных выше условий малости σ и d/R приводит к следующему общему выражению для энергии:

$$E = C_1 A + C_2 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + C_3 A^{2/3} + C_4 \left(\frac{A - 2Z}{A} \right)^2. \quad (7. 25)$$

Аналогичный вид имеет полуэмпирическая формула Вейцзекера [73, 74] без учета четно-нечетных аномалий. В ней первый член — объемная часть энергии. В приближении Хартри — Фока она дается соотношением (7. 22). Эмпирическое значение коэффициента $C_1 \approx -15$ Мэв.

Второй член — кулоновская энергия отталкивания протонов. Пренебрегая малыми обменной и поверхностной кулоновской энергиями, нетрудно найти

$$C_2 = \frac{6}{5} \frac{e^2 p_0}{(9\pi)^{1/3}}.$$

Удобно ввести величину

$$C'_2 = 4C_2 \frac{Z^2}{A^2} = C_2 (1 - 2\sigma + \sigma^2). \quad (7. 26)$$

Тогда второй член выражения (7. 25) примет вид $C'_2 \frac{A^{5/3}}{4}$. Наличие в C'_2 линейного по σ члена является источником асимметрии между протонами и нейтронами. Эмпирическое значение коэффициента $C_2 = 0,7$ Мэв; то же значение дает и приведенная формула.

Третий член — поверхностная энергия. Несложное, хотя и громоздкое, вычисление дает

$$C_3 = \beta_1 \frac{a}{d} + \beta_2 \frac{d}{a}, \quad (7.27)$$

$$\beta_1 = \frac{\pi}{40 (9\pi)^{1/3} M (a-c)^2} y^3,$$

$$\beta_2 = \frac{9}{40 (9\pi)^{1/3} M a^2} y^3 \left[-1 - \frac{40}{9\pi} \frac{M}{M_{\text{эфф}}} c \rho_0 + \frac{5\pi}{27} \frac{a^2}{(a-c)^2} \Phi_2(y) \right],$$

$$\Phi_2(y) = y + \frac{81}{10y^3} + \frac{81}{4} \frac{\sin 2y}{y^4} + \frac{27}{2y^5} + 81 \frac{\cos 2y}{y^5} + O(y^{-6}),$$

где $y = ar_0$. Эмпирическое значение $C_3 \approx 18$ Мэв.

Наконец, последний член выражения (7.25) отвечает так называемой энергии симметрии, связанной с неравенством чисел протонов и нейтронов*. Коэффициент C_4 , эмпирическое значение которого равно ≈ 24 Мэв, имеет вид

$$C_4 = \frac{y^2}{6Ma^2} \left[1 - \frac{2c\rho_0}{\pi} \cdot \frac{M}{M_{\text{эфф}}} + \frac{\pi}{12} \cdot \frac{a^2}{(a-c)^2} \Phi_3(y) \right], \quad (7.28)$$

$$\Phi_3(y) = y + \frac{6}{y} + \frac{3}{2y^2} \sin 2y - \frac{9}{y^3} \sin^2 y.$$

Численно для принятого значения ρ_0 $\Phi_2(y) = 3,70$; $\Phi_3(y) = 5,09$; отсюда нетрудно найти $C_4 \approx 30$ Мэв.

7.6. Перейдем к нахождению равновесных значений параметров d и σ , для чего проведем варьирование выражения (7.25) по этим параметрам.

Начнем с энергии симметрии. Часть выражения (7.25), содержащая параметр σ , имеет, согласно соотношению (7.26), вид

$$-\frac{C_2}{2} A^{5/3} \sigma + \left(C_4 A + \frac{C_2 A^{5/3}}{4} \right) \sigma^2.$$

Вторым членом в коэффициенте при σ^2 можно пренебречь ввиду его малости. Варьируя это выражение по σ , найдем

$$\sigma \approx \frac{C_2}{4C_4} A^{2/3} \approx 0,006 A^{2/3}. \quad (7.29)$$

Эта величина имеет ярко выраженное кулоновское происхождение. Ее рост с A объясняется необходимостью компенсации увеличивающихся с ростом A кулоновских сил. Полученная зависимость в среднем неплохо согласуется с опытом.

* Появление энергии симметрии связано, в частности, с принципом Паули: замена всех нуклонов протонами (либо нейтронами) сопровождается увеличением энергии системы из-за возрастания обменного отталкивания.

От параметра d зависит только коэффициент C_3 . Варьируя выражение (7. 27) по этому параметру, найдем

$$d = \left(\frac{\beta_1}{\beta_2} \right)^{1/2} a \approx 2,5 \text{ ферми.} \quad (7. 30)$$

Эта величина также неплохо согласуется с опытом. Для расстояния, на котором плотность спадает с 0,9 до 0,1 своего максимального значения, опыт дает величину около 2,4 ферми. Расчетное значение для этого расстояния, полученное из соотношений (7. 24) и (7. 30), составляет 2,0 ферми *. Таким образом, рассматриваемая теория объясняет не только независимость d от массового числа, но и величину этого параметра.

Подстановка выражения (7. 30) в (7. 27) позволяет определить значение константы C_3 . Это значение оказывается заметно завышенным по сравнению с опытом, что объясняется сильным влиянием не учтенных эффектов динамической корреляции.

В поверхностной области ядра роль квантовых эффектов в принципе могла бы быть значительной, однако в численном отношении вклад этих эффектов оказывается малым. Оценивая с помощью выражения (7. 24) величину $\frac{1}{72M} \int d\vec{x} \frac{(\nabla \cdot \mathbf{q})^2}{q}$ [см. соотношение (5. 23)] **, нетрудно видеть, что вклад квантовой поправки в C_3 составляет всего около 1 Мэв; аналогично мало меняется и величина d .

Таким образом, целый ряд характеристик атомного ядра может быть получен уже в приближении Хартри — Фока. Однако для других характеристик эффекты силовой корреляции имеют определяющее значение (см. § 18).

7. 7. Попытка рассматривать радиус ядра R как вариационный параметр в приближении Хартри — Фока к успеху не приводит. Действительно, при малых R (или больших ρ_0) выражение (7. 22) имеет вид

$$E \sim -\rho_0^3 \sim -R^{-3}$$

и неограниченно растет по абсолютной величине с уменьшением R . Таким образом, система нуклонов в рассматриваемом приближении стремится к самопроизвольному сжатию. Поскольку при этом в область действия ядерных сил попадает все большее число нуклонов, энергия взаимодействия становится пропорциональной A^2 , и свойство насыщения ядерных сил теряется.

Природа этой трудности состоит в увеличении числа эффективно взаимодействующих частиц при возрастании плотности. Конечно, наличие отталкивания на малых расстояниях устраняет

* Корреляционные эффекты несколько увеличивают это значение (см. § 18).

** Второй член выражения (5. 23) обращается в нуль по теореме Гаусса. Строго говоря, соотношением (5. 23) пользоваться нельзя ввиду существенной роли обменных эффектов. Тем не менее можно думать, что это не изменит заметным образом приведенных оценок.

эту трудность. Однако сколько-нибудь точный учет соответствующего эффекта в приближении Хартри — Фока невозможен. Уже в этом приближении можно найти достаточный критерий того, что такое сжатие действительно будет иметь место (ниже в гл. IV будет показано, что этот критерий является одновременно и необходимым). Достаточно учесть то, что энергия в приближении Хартри — Фока всегда выше истинного значения энергии. Этот факт проще всего усмотреть, обращаясь к выводу уравнения Хартри — Фока с помощью вариационного принципа. Поэтому, если мы найдем критерий, при выполнении которого энергия стремится к $-\infty$ уже в приближении Хартри — Фока, то то же заведомо будет иметь место при точном рассмотрении проблемы. Таким образом, искомый критерий может быть получен из исследования поведения энергии в приближении Хартри — Фока при больших значениях p_0 и выяснения условий обращения ее в $-\infty$.

Для этого достаточно рассмотреть однородное распределение нуклонов и положить $f_{(p)} = f_{(n)}$. Обменные члены в энергии играют при большом p_0 малую роль по сравнению с членами прямого взаимодействия частиц. Поэтому общее выражение для энергии можно записать в виде

$$\mathcal{E} = \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3p \theta(p_0^2 - p^2) \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{B}{2} \right),$$

$$B = \frac{p_0^3}{3\pi^2} \int d\vec{\xi} V(\xi).$$

Взяв выражение для V в наиболее общем виде (1. 7), нетрудно прийти к следующему выражению для \mathcal{E} :

$$\mathcal{E} = \frac{2}{9\pi^4} \kappa p_0^6 + \frac{p_0^5}{15\pi^2 M}, \quad (7. 31)$$

где

$$\kappa = \int d\vec{\xi} \left\{ V_W(\xi) + \frac{1}{2} [V_B(\xi) + V_H(\xi)] - \frac{1}{4} V_M(\xi) \right\}.$$

При больших p_0 доминирует первый член, а условием $\mathcal{E} \rightarrow -\infty$ является неравенство [75]

$$\kappa < 0. \quad (7. 32)$$

Из этого критерия видно, что как вигнеровские, так и серберовские силы притяжения неизбежно приводят к сжатию ядерного вещества. Введение «твердой сердцевины» приводит к $\kappa \rightarrow +\infty$ * и тем самым устраняет указанные трудности, что следует и из простых физических соображений.

Условие (7. 30) дает количественное уточнение известных выводов о знакопеременности потенциала в проблеме насыщения ядерных сил [28].

* В области больших p_0 введение псевдопотенциала недопустимо, так как нарушается условие (1. 12).

ГЛАВА III

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА

§ 8. ДЫРОЧНЫЙ ФОРМАЛИЗМ

8. 1. Переход к приближению Хартри — Фока производился путем замены точного гамильтониана H (3. 19) гамильтонианом H_0 (4. 29). Рассмотрим разность

$$\begin{aligned} H' &= H - H_0 = \\ &= \frac{1}{2} \int dq dq' V(q, q') \{ \psi^+(q) \psi^+(q') \psi(q') \psi(q) - \\ &- 2R(q', q') \psi^+(q) \psi(q) + 2R(q, q') \psi^+(q) \psi(q') + \\ &+ R(q, q) R(q', q') - R(q, q') R(q', q) \}. \end{aligned} \quad (8. 1)$$

Для простоты предположим, что потенциал V является здесь просто функцией координат, а не оператором.

Гамильтониан H' носит название гамильтониана корреляционного взаимодействия и описывает те эффекты, которые связаны с отсутствием определенных индивидуальных состояний частиц системы. Эти эффекты проявляются, в частности, в том, что мгновенные характеристики разных частиц системы оказываются взаимно связанными. Например, вероятность обнаружить частицу в данной точке пространства зависит от расположения остальных частиц в тот же момент времени.

Подобная корреляция характеристик частиц, обусловленная взаимодействием между ними, называется обычно силовой (динамической) корреляцией*. Простейшей возможностью учета эффектов силовой корреляции является формальное разложение физических величин в ряд по H' , т. е. построение соответствующей теории возмущений. В настоящей главе строится такая теория возмущений в полевой форме, приданной ей (по аналогии с квантовой теорией поля) в работах [76—79].

* Помимо динамической имеется еще статистическая (обменная) корреляция, связанная с принципом Паули. Она учитывается и в приближении Хартри — Фока, где ей соответствуют выражения, содержащие обменный оператор \mathcal{P} .

Полевая форма теории возмущений проще, компактнее и нагляднее обычной шредингеровской теории возмущений. С этой точки зрения существенную роль играет введение диаграммной техники и формулировка правил Фейнмана, позволяющих без труда построить графический образ и аналитическое выражение любого члена разложения по H' .

Роль теории возмущений не исчерпывается теми задачами, где корреляционные эффекты фактически малы и где можно ограничиться несколькими первыми членами указанного разложения. Теория возмущений оказывает существенную помощь при формулировке точных уравнений теории и, что гораздо более важно с практической точки зрения, при построении приближенных выражений, содержащих некоторую бесконечную подсовкупность членов ряда теории возмущений. Анализ различных диаграмм теории возмущений позволяет отобрать наиболее важные из них и произвести эффективное их суммирование.

8. 2. Прежде чем переходить к построению теории возмущений, необходимо несколько видоизменить интерпретацию операторов в представлении чисел заполнения. Для этого введем понятие о дырках.

Для построения волновой функции любого состояния системы необходимо подействовать на волновую функцию вакуумного состояния операторами рождения частиц. В этой процедуре вакуумное состояние выступает как своего рода начало отсчета, поэтому в выражении для волновой функции интересующего нас состояния фигурируют операторы рождения всех частиц системы.

Такой подход, однако, является по разным причинам неудобным. Гораздо целесообразнее выбрать в качестве начала отсчета волновую функцию самой рассматриваемой системы Ψ_0 в приближении Хартри — Фока. Тогда описание интересующего нас состояния системы сведется к установлению отличия его от состояния Ψ_0 ; это отличие состоит в перераспределении частиц по уровням: заполняются некоторые прежде свободные и освобождаются некоторые прежде занятые уровни.

Преимущества такого подхода состоят в следующем. Прежде всего, новое начало отсчета — состояние Ψ_0 — имеет несравненно больший физический смысл, чем вакуумное состояние; в частности, оно отвечает тому же числу частиц, что и реальное состояние системы. Далее, нередки случаи, когда реальное состояние системы отличается от Ψ_0 сравнительно незначительным перераспределением частиц. В этом случае обсуждаемый подход является менее громоздким и сложным.

Кроме того, устраняются некоторые формальные неудобства старого подхода, и аппарат теории многих частиц еще в большей степени сближается с аппаратом релятивистской квантовой теории поля (см. раздел 8. 4).

8. 3. Переходим к перестройке аппарата представления чисел заполнения. Динамическими переменными теперь будут служить числа частиц $n_v^{(p)}$ на уровнях, которые в состоянии Ψ_0 были свободны, и числа свободных мест — дырок — $n_v^{(h)}$ на уровнях, которые в состоянии Ψ_0 были заняты. Само состояние Ψ_0 , очевидно, отвечает равным нулю числам заполнения частиц и дырок.

Необходимо привести в соответствие с новым описанием само выражение для оператора поля. Перепишем разложение (3. 9) в следующем виде:

$$\Psi(q) = \sum_v [(1 - \sqrt{n_v}) A_v + \sqrt{n_v} A_v^+] \chi_v(q), \quad (8. 2)$$

где n_v — числа заполнения в состоянии Ψ_0 . Рассмотрим основное состояние системы. Первое слагаемое соотношения (8. 2) отлично от нуля лишь для незанятых состояний ($\varepsilon_v > \varepsilon_F$), где $n_v = 0$, и может по-прежнему интерпретироваться как оператор уничтожения частиц. Второе слагаемое отлично от нуля лишь для занятых состояний ($n_v = 1$). Его можно интерпретировать как оператор уничтожения частиц в занятых состояниях, или, что то же, как оператор рождения дырок. Аналогично оператор A_v^+ , действующий ниже границы Ферми, приводит к рождению частицы (к уничтожению дырки).

Разложения (3. 9) можно, следовательно, переписать в виде

$$\left. \begin{aligned} \Psi(q) &= \sum_v A_v \chi_v(q), \\ \Psi^+(q) &= \sum_v A_v^+ \chi_v(q), \end{aligned} \right\} \quad (8. 3)$$

где

$$\left. \begin{aligned} A_v &= a_v (\varepsilon_v > \varepsilon_F), \quad A_v = b_v^+ (\varepsilon_v < \varepsilon_F), \\ A_v^+ &= a_v^+ (\varepsilon_v > \varepsilon_F), \quad A_v^+ = b_v (\varepsilon_v < \varepsilon_F). \end{aligned} \right\} \quad (8. 4)$$

Здесь a , a^+ и b , b^+ — операторы уничтожения и рождения частиц и дырок соответственно.

Используя определение дырочных операторов и общие правила коммутации (3. 7), можно написать

$$\left. \begin{aligned} \{b_\mu^+, b_\nu\} &= \delta_{\mu\nu}, \quad \{a_\mu^+, a_\nu\} = \delta_{\mu\nu}, \\ \{b_\mu, b_\nu\} &= \{b_\mu^+, b_\nu^+\} = \{a_\mu, a_\nu\} = \{a_\mu^+, a_\nu^+\} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (8. 5)$$

Операторы частиц и дырок антикоммутируют друг с другом, поскольку операторы a и b всегда относятся к различным состояниям.

Операторы a , a^+ и b , b^+ действуют соответственно на числа заполнения частиц $n_v^{(p)}$ и дырок $n_v^{(h)}$ согласно соотношениям (3. 5). Поскольку волновая функция Ψ_0 отвечает равным нулю числам заполнения $n_v^{(p)}$ и $n_v^{(h)}$, имеют место равенства

$$\left. \begin{aligned} a_v \Psi_0 &= b_v \Psi_0 = 0, \\ \Psi_0^* a_v^+ &= \Psi_0^* b_v^+ = 0. \end{aligned} \right\} \quad (8. 6)$$

Что же касается операторов чисел заполнения частиц и дырок, то они, очевидно, имеют вид

$$n_v^{(p)} = a_v^+ a_v, \quad n_v^{(h)} = b_v^+ b_v. \quad (8.7)$$

Переход к дырочному описанию не связан с каким-либо существенным изменением аппарата, а сводится лишь к иной интерпретации входящих в него величин.

8. 4. Переход к дырочному формализму приводит к дальнейшему сближению теории многих частиц с теорией релятивистского квантованного ферми-поля, описывающей не только собственно частицы, но и античастицы, которые можно в известном смысле интерпретировать как дырки в ненаблюдаемом фоне частиц отрицательной энергии.

Дырки в теории многих частиц и античастицы в теории поля имеют много общих черт. Ряд процессов в теории многих частиц может интерпретироваться на языке, принятом в теории поля. Например, переход системы из основного состояния в возбужденное заключается в простейшем случае в том, что одна из частиц системы переходит из заполнения Ферми в состояние с энергией, большей энергии Ферми. На дырочном языке это означает, что рождается пара — частица и дырка (последняя отвечает освобожденному уровню). Возвращение возбужденной системы в основное состояние отвечает взаимному уничтожению (аннигиляции) частицы и дырки. Эти процессы аналогичны процессам рождения и аннигиляции частицы и античастицы в квантовой теории поля. Подобного рода интерпретация, заимствованная из релятивистской квантовой теории поля, оказывается весьма плодотворной и удобной.

Однако эта аналогия не полная. В релятивистской теории поля имеется полная симметрия между частицами и дырками, отвечающая вырождению уровней энергии частиц по ее знаку. Эта симметрия (ее называют зарядовой) имеет целый ряд следствий, к числу которых относится, например, теорема Фарри (см. § 13).

В теории многих частиц между частицами и дырками нет симметрии. Это можно видеть хотя бы из того, что области спектра, отвечающие частицам и дыркам, существенным образом различаются: одна из них простирается до бесконечных значений энергий ($\infty > \varepsilon_v > \varepsilon_F$), другая ограничена низшими уровнями ($0 < \varepsilon_v < \varepsilon_F$). Указанная симметрия обнаруживается лишь в отдельных случаях, когда определяющую роль играют частицы и дырки, расположенные в непосредственной близости от границы Ферми.

8. 5. Переход к дырочному формализму приводит к тому, что операторы поля разбиваются на сумму рождающей и уничтожающей частей, каждая из которых содержит только операторы рождения и уничтожения (см. раздел 8. 3):

$$\begin{aligned} \Psi(q) &= \Psi(q)_{(+)} + \Psi(q)_{(-)}, \\ \Psi^+(q) &= \Psi^+(q)_{(+)} + \Psi^+(q)_{(-)}. \end{aligned}$$

Здесь индексы (+) и (—) относятся соответственно к рождающей и уничтожающей частям. Отметим, что при сопряжении (+) \rightleftharpoons (—), в частности $\Psi^+(q)_{(+)} = [\Psi(q)_{(-)}]^\dagger$.

Исходя из правил коммутации (8. 5), видно, что единственные отличные от нуля антикоммутирующие операторы $\Psi_{(\pm)}$ и $\Psi_{(\pm)}^\dagger$ имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \{ \Psi(q)_{(+)}, \Psi^+(q')_{(-)} \} &= \sum_{\nu} n_{\nu} \chi_{\nu}^*(q') \chi_{\nu}(q), \\ \{ \Psi(q)_{(-)}, \Psi^+(q')_{(+)} \} &= \sum_{\nu} (1 - n_{\nu}) \chi_{\nu}^*(q') \chi_{\nu}(q). \end{aligned} \right\} \quad (8. 8)$$

Здесь использовано соотношение $(1 - \sqrt{n_{\nu}})^2 = 1 - n_{\nu}$, вытекающее из равенства $n_{\nu} = 0, 1$. Верхний антикоммутатор совпадает просто с матрицей плотности $R(q, q')$ [см. выражение (4. 7)], нижний в силу условия полноты равен $\delta(q - q') - R(q, q')$.

Введем важное понятие нормального произведения (N -произведения) операторов поля. Чтобы перейти от обычного произведения операторов к нормальному, необходимо разбить каждый из операторов на сумму рождающей и уничтожающей частей и переставить эти части таким образом, чтобы все операторы рождения стояли слева от операторов уничтожения. При этом каждая перестановка местами пары стоящих рядом операторов должна сопровождаться изменением знака.

Приведем простейшие примеры N -произведений:

$$\begin{aligned} N(1) &= 1, & N[\Psi_{(-)} \Psi_{(-)}^\dagger] &= \Psi_{(-)} \Psi_{(-)}^\dagger, \\ N(\Psi) &= \Psi, & N[\Psi_{(+)} \Psi_{(+)}^\dagger] &= \Psi_{(+)} \Psi_{(+)}^\dagger, \\ N(\Psi^\dagger) &= \Psi^\dagger, & N[\Psi_{(-)} \Psi_{(+)}^\dagger] &= -\Psi_{(+)}^\dagger \Psi_{(-)}. \end{aligned}$$

Рассмотрим более сложный пример:

$$\begin{aligned} N[\Psi^+(q) \Psi(q')] &= \Psi^+(q)_{(+)} \Psi(q')_{(+)} + \Psi^+(q)_{(+)} \Psi(q')_{(-)} + \\ &+ \Psi^+(q)_{(-)} \Psi(q')_{(-)} - \Psi(q')_{(+)} \Psi^+(q)_{(-)}. \end{aligned}$$

Это выражение лишь своим последним членом отличается от простого произведения операторов, где этот член равен $\Psi^+(q)_{(-)} \Psi(q')_{(+)}$. Поэтому разность между простым и нормальным произведениями рассматриваемых операторов сводится к соответствующему антикоммутатору. Используя выражения (8. 8), получим

$$N[\Psi^+(q') \Psi(q)] = \Psi^+(q') \Psi(q) - R(q, q'). \quad (8. 9)$$

Аналогичным, но более громоздким способом можно получить соответствующее соотношение для произведения четырех операторов поля:

$$\begin{aligned} N[\Psi^+(q) \Psi^+(q') \Psi(q') \Psi(q)] &= \Psi^+(q) \Psi^+(q') \Psi(q') \Psi(q) - \\ &- R(q, q) \Psi^+(q') \Psi(q') - R(q', q') \Psi^+(q) \Psi(q) + \\ &+ R(q, q') \Psi^+(q) \Psi(q') + R(q', q) \Psi^+(q') \Psi(q) + \\ &+ R(q, q) R(q', q') - R(q, q') R(q', q). \end{aligned} \quad (8. 10)$$

Нормальные произведения операторов поля обладают двумя важными свойствами. Прежде всего, под знаком нормального произведения можно производить любую перестановку операторов, меняя при этом соответствующее число раз общий знак произведения. В самом деле, если эта перестановка не меняет относительного порядка операторов рождения и уничтожения, то приведенное утверждение очевидно, поскольку при этом антикоммутатор переставляемых операторов равен нулю. Пусть теперь перестановке подвергаются операторы разного типа. Такая перестановка (при выполнении условия о знаках) также не меняет результата, так как операторы в конечном счете все равно располагаются в соответствии с определением N -произведения.

Другое свойство всякого N -произведения [кроме $N(1) = 1$] состоит в том, что его среднее по состоянию Ψ_0 равно нулю:

$$\langle \Psi_0 | N(\dots) | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (8.11)$$

Это важное равенство является непосредственным следствием соотношений (8.6).

8.6. Введение понятия нормального произведения позволяет существенным образом упростить выражения для гамильтонианов H_0 и H' .

Используя соотношение (8.9), запишем выражение (4.1) в виде

$$\begin{aligned} H_0 &= \int_{q' \rightarrow q} dq (T + W)_q \Psi^+(q') \Psi(q) + C = \\ &= \int dq (T + W)_q \{ N[\Psi^+(q') \Psi(q)] + R(q, q') \} + C. \end{aligned}$$

Последние два члена этого выражения можно записать в виде [см. приложение А и соотношение (4.27)]

$$\text{Sp}(T\mathbf{e}) + \frac{1}{2} \text{Sp}(V(q, q')(1 - \mathcal{F}_{qq'})\mathbf{e}_q\mathbf{e}_{q'}) = \text{Sp}\left[\left(T + \frac{W}{2}\right)\mathbf{e}\right].$$

Согласно выражению (4.35), эта величина равна энергии в приближении Хартри — Фока. Отсюда

$$H_0 = E_0 + \int dq N[\Psi^+(q)(T + W)\Psi(q)]. \quad (8.12)$$

Таким образом, если за начало отсчета энергии принять энергию нулевого приближения, то гамильтониан H_0 сводится к нормальному произведению. Аналогичным образом оператор числа частиц N (см. § 3) можно представить в виде

$$N = N + \int dq N[\Psi^+(q)\Psi(q)]. \quad (8.13)$$

Входящий в правую часть этого выражения оператор после подстановки в него разложения (8.3) приводится с учетом выражений (8.7) к виду

$$\sum_{\nu} (n_{\nu}^{(p)} - n_{\nu}^{(h)}),$$

т. е. описывает разность числа частиц и дырок. Этот оператор, как и N , коммутирует, очевидно, с полным гамильтонианом системы.

Переходим к упрощению гамильтониана взаимодействия. Сравнивая выражение в фигурных скобках соотношения (8. 1) с выражением (8. 10), получим

$$H' = \frac{1}{2} \int dq dq' V(q, q') N [\psi^+(q) \psi^+(q') \psi(q') \psi(q)].$$

Можно без труда показать, что для потенциала V , являющегося оператором, это выражение примет вид

$$H' = \frac{1}{2} \int dq dq' N [\psi^+(q) \psi^+(q') V(q, q') \psi(q') \psi(q)]. \quad (8. 14)$$

Возможность представления гамильтониана взаимодействия в виде нормального произведения обусловлена исключительно тем фактом, что в качестве нулевого приближения выбрано приближение Хартри — Фока. Это существенно упрощает последующее рассмотрение.

§ 9. МАТРИЦА РАССЕЯНИЯ

9. 1. Перейдем к построению аппарата теории возмущений, позволяющего производить разложение физических величин в ряд по H' .

Переведем в представление взаимодействия операторы поля $\psi(q)$, $\psi^+(q)$, обозначая буквой x совокупность координаты q и времени t . Согласно общей формуле (2. 7),

$$\psi_b(x) = \exp(iH_0 t) \psi(q) \exp(-iH_0 t),$$

где в качестве H_0 мы выберем гамильтониан приближения Хартри — Фока (4. 1). Соответственно зависимость от времени волновой функции системы будет определяться корреляционным гамильтонианом H' .

Используем для вычисления $\psi_b(x)$ общее соотношение (см. приложение Б)

$$\exp(a) b \exp(-a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \underbrace{[a [a \dots [a, b] \dots]]}_n,$$

где a и b — произвольные операторы. Учитывая правила коммутации (3. 10), будем иметь

$$[H_0, \psi(q)] = -(T + W) \psi(q),$$

откуда

$$\overbrace{[H_0 \dots [H_0, \psi(q)] \dots]}^n = (-1)^n (T + W)^n \psi(q)$$

и

$$\Psi_B(x) = \exp[-it(T + W)] \Psi(q). \quad (9.1)$$

Дифференцируя это соотношение по времени, можно найти уравнение движения для оператора $\Psi_B(x)$:

$$i \frac{\partial \Psi_B(x)}{\partial t} = (T + W) \Psi_B(x). \quad (9.2)$$

Подставляя в выражение (9.1) разложение (8.3) и учитывая соотношение (4.2), находим окончательное выражение для операторов поля:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_B(x) &= \sum_{\nu} A_{\nu} \chi_{\nu}(q) \exp(-i\varepsilon_{\nu}t), \\ \Psi_B^+(x) &= \sum_{\nu} A_{\nu}^+ \chi_{\nu}^*(q) \exp(i\varepsilon_{\nu}t). \end{aligned} \right\} \quad (9.3)$$

Как видно из этого соотношения, рассмотренное преобразование свелось к замене не зависящей от времени части волновой функции частицы $\chi_{\nu}(q)$ полной волновой функцией $\chi_{\nu}(q) \exp(-i\varepsilon_{\nu}t)$.

Установим правила коммутации операторов $\Psi_B(x)$, $\Psi_B^+(x)$. Учитывая соотношения (8.5) и (9.3), имеем

$$\{\Psi_B(x), \Psi_B^+(x')\} = \sum_{\nu} \chi_{\nu}^*(q') \chi_{\nu}(q) \exp[-i\varepsilon_{\nu}(t-t')]. \quad (9.4)$$

Остальные антикоммутаторы равны нулю. При $t = t'$ правая часть выражения (9.4) переходит в $\delta(q - q')$, что, очевидно, находится в соответствии с соотношением (2.11).

Переведем далее в представление взаимодействия гамильтониан H' . Принимая во внимание соотношение (2.10), можно написать

$$\begin{aligned} H'_B(t) &= \frac{1}{2} \times \\ &\times \int dq dq' N [\Psi_B^+(x) \Psi_B^+(x') V \Psi_B(x') \Psi_B(x)]. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Здесь

$$x = (q, t); \quad x' = (q', t).$$

9.2. Закон изменения со временем волновой функции системы в представлении взаимодействия определяется общим уравнением (2.6)

$$i \frac{\partial \Psi_B(t)}{\partial t} = H'_B(t) \Psi_B(t).$$

Введем оператор (S -матрицу или матрицу рассеяния) $S(t, t_0)$, связывающий значения волновой функции в моменты времени t и t_0 :

$$\Psi_B(t) = S(t, t_0) \Psi_B(t_0). \quad (9.6)$$

S -матрица должна удовлетворять некоторым условиям. Во-первых, она должна быть унитарной матрицей

$$SS^+ = S^+S = 1;$$

это свойство обеспечивает сохранение нормы волновой функции. Во-вторых, S -матрица должна обладать следующими очевидными свойствами*:

$$\left. \begin{aligned} S(t_1, t_3) &= S(t_1, t_2) S(t_2, t_3), \\ S(t_1, t_2) &= S^+(t_2, t_1). \end{aligned} \right\} \quad (9.7)$$

Второе из этих соотношений вытекает из условия унитарности и условия

$$S(t_0, t_0) = 1. \quad (9.8)$$

Найдем уравнение, которому удовлетворяет S -матрица. Подставляя выражение (9.6) в уравнение Шредингера, нетрудно получить

$$i \frac{\partial S(t, t_0)}{\partial t} = H'_B(t) S(t, t_0). \quad (9.9)$$

Начальным условием для решения этого уравнения является соотношение (9.8).

Рассмотрим процедуру разложения S -матрицы в ряд по H'_B :

$$S(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} S_n(t, t_0). \quad (9.10)$$

Здесь S_n содержит произведение n операторов H'_B ; нулевой член разложения выбран равным единице, так как в отсутствие H'_B никакой эволюции Ψ_B не происходит.

Приведем уравнение (9.9) к интегральной форме, интегрируя обе его части по t с учетом условия (9.8):

$$S(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t d\tau H'_B(\tau) S(\tau, t_0).$$

Подстановка в это уравнение разложения (9.10) дает рекуррентную связь:

$$S_n(t, t_0) = -i \int_{t_0}^t d\tau H'_B(\tau) S_{n-1}(\tau, t_0),$$

используя которую можно написать

$$S_n(t, t_0) = (-i)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n H'_B(\tau_1) \dots H'_B(\tau_n). \quad (9.11)$$

* Эволюцию системы от t_3 до t_1 можно рассматривать как результат последовательной эволюции сначала от t_3 до t_2 и затем от t_2 до t_1 .

Операторы H'_b в этом выражении расположены в хронологическом порядке ($\tau_1 > \tau_2 \dots > \tau_n$), т. е. их временной аргумент монотонно возрастает справа налево.

9.3. Сложные пределы интегрирования делают выражение (9.11) неудобным. Этот недостаток можно устранить, если ввести понятие о T -произведении (хронологическом произведении) операторов.

Чтобы получить T -произведение из обычного произведения операторов поля, необходимо переставить последние таким образом, чтобы их временные аргументы возрастали справа налево. Общий знак выбирается в зависимости от того, четную или нечетную перестановку операторов приходится при этом делать. В частности, T -произведение двух операторов поля $F_1(x_1)$, $F_2(x_2)$ равно *

$$T [F_1(x_1) F_2(x_2)] = \begin{cases} F_1(x_1) F_2(x_2) & t_1 > t_2 \\ -F_2(x_2) F_1(x_1) & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (9.12)$$

или

$$T [F_1(x_1) F_2(x_2)] = \theta(t_1 - t_2) F_1 F_2 - \theta(t_2 - t_1) F_2 F_1. \quad (9.12')$$

Хронологическое упорядочение имеет смысл в применении не только к операторам поля, но и к их комбинациям, содержащим произведение отнесенных к одному моменту времени операторов поля. Имеется в виду, в частности, T -произведение гамильтонианов H'_b :

$$T [H'_b(\tau_1) \dots H'_b(\tau_n)],$$

которое предполагает, как и выше, расположение операторов H'_b в порядке возрастания τ справа налево. В данном случае, однако, при перестановке операторов H'_b изменения знака не происходит, поскольку H'_b содержит произведение четного числа операторов поля. Поэтому

$$T [H'_b(\tau_1) H'_b(\tau_2)] = \theta(\tau_1 - \tau_2) H'_b(\tau_1) H'_b(\tau_2) + \theta(\tau_2 - \tau_1) H'_b(\tau_2) H'_b(\tau_1). \quad \text{[(9.12'')}]$$

T -упорядочение не затрагивает взаимного расположения отнесенных к одному времени операторов поля, входящих в H'_b ; это расположение остается неизменным. Поэтому утверждение о возможности перестановки операторов под знаком T -произведения относится лишь к операторам H'_b в целом, но не к их составным частям.

* Под знаком T -произведения (как и N -произведения) можно менять порядок операторов, выбирая при этом соответствующий общий знак. Как и в случае N -произведения, операторы, в конце концов, будут расположены в нужном (в данном случае хронологическом) порядке.

Теперь в выражении (9. 11) можно сделать замену:

$$H'_b(\tau_1) \dots H'_b(\tau_n) \rightarrow T [H'_b(\tau_1) \dots H'_b(\tau_n)].$$

Если произвести расширение пределов интегрирования до наивысшего значения t , то полученный интеграл можно представить в виде суммы $n!$ (по числу перестановок $\tau_1 \dots \tau_n$) интегралов типа (9. 11), оказывающихся равными друг другу. Это позволяет написать

$$S_n(t, t_0) = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^t d\tau_n T [H'_b(\tau_1) \dots H'_b(\tau_n)].$$

Для иллюстрации рассмотрим член с $n = 2$:

$$S_2 = -\frac{1}{2} \left\{ \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 H'_b(\tau_1) H'_b(\tau_2) + \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{\tau_1}^t d\tau_2 H'_b(\tau_2) H'_b(\tau_1) \right\}.$$

Здесь мы учли соотношение (9. 12''). Меняя во втором интеграле порядок интегрирования $\int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{\tau_1}^t d\tau_2 \rightarrow \int_{t_0}^t d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1$ и делая замену $\tau_1 \leftrightarrow \tau_2$, убеждаемся, что слагаемые S_2 равны друг другу; это возвращает нас к прежнему выражению (9. 11) с $n = 2$.

9. 4. В дальнейшем нас будет интересовать S -матрица, у которой одна (или обе) из величин t, t_0 бесконечна. Речь идет в первую очередь о собственно S -матрице $S(\infty, -\infty)$. Подставляя полученное выше выражение для S_n в выражение (9. 10), можно написать *

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \dots d\tau_n T [H'_b(\tau_1) \dots H'_b(\tau_n)] \equiv T \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} d\tau H'_b(\tau) \right]. \quad (9. 13)$$

Поведение $H'_b(\tau)$ как функции τ носит в общем осцилляторный характер. Поэтому несобственные интегралы в выражении (9. 13) не имеют определенного предела при стремлении t к ∞ и t_0 к $-\infty$. Для придания этим интегралам определенного смысла следует ввести в подынтегральное выражение в показателе экспоненты

* S -матрица $S(\infty, -\infty)$ обозначается просто через S .

фактор $\exp(-\delta|\tau|)$ при $\delta \rightarrow +0$. Иными словами, следует сделать замену

$$H'_B(\tau) \rightarrow H'_B(\tau) \exp(-\delta|\tau|), \quad (9.14)$$

которая в дальнейшем будет подразумеваться. Подчеркнем, что ни одна из физически наблюдаемых величин не содержит в пределе $\delta \rightarrow 0$ никаких неопределенностей.

Используя выражение (9.14), можно написать окончательно:

$$S = T \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int d^4x_1 d^4x_2 \exp(-\delta|t_1|) \times \right. \\ \left. \times N [\Psi_B^+(x_1) \Psi_B^+(x_2) V(x_1, x_2) \Psi_B(x_2) \Psi_B(x_1)] \right\}. \quad (9.15)$$

Здесь $d^4x = dq dt$; $V(x_1, x_2) = V(q_1, q_2) \delta(t_1 - t_2)$ (запаздывание не учитывается). Интегрирование производится по всему четырехмерному пространству.

Помимо оператора $S(\infty, -\infty)$ нам придется иметь дело также с оператором $S(0, -\infty)$. Соответствующее выражение содержит, очевидно, интегрирование по времени в пределах от $-\infty$ до 0.

9.5. Найдем соотношение, выражающее закон сохранения энергии на языке S -матрицы. Убедимся прежде всего в том, что $S(t, -\infty)$ может быть представлена в виде

$$S(t, -\infty) = 1 + \int_{-\infty}^t d\tau \exp(iH_0\tau) \sigma \times \\ \times \exp(-iH_0\tau) \exp(-\delta|\tau|), \quad (9.16)$$

где σ — некоторый не зависящий от τ оператор. Для доказательства сравним величины

$$i \frac{\partial S}{\partial t} - i \exp(iH_0t) \sigma \exp(-iH_0t)$$

и

$$H'_B S = \exp(iH_0t) H' \exp(-iH_0t) \times \\ \times \left\{ \int_{-\infty}^t d\tau \exp(iH_0\tau) \sigma \exp(iH_0\tau - \delta|\tau|) + 1 \right\}.$$

Делая в последнем выражении замену $\tau \rightarrow t + x$, получаем

$$\exp(iH_0t) H' \times \\ \times \left\{ \int_{-\infty}^0 dx \exp(iH_0x) \sigma \exp(-iH_0x - \delta|t+x|) + 1 \right\} \exp(-iH_0t).$$

В пределе $\delta \rightarrow 0$ здесь можно заменить $\delta|t+x|$ на $\delta|x|$; затухающий множитель дает вклад только вблизи бесконечных пределов

интегрирования. Мы убеждаемся, что оператор σ действительно не зависит от времени, поскольку оно выпадает из сравниваемых выражений.

Рассмотрим матричный элемент $\langle \Psi_{0(m)} | \mathcal{S} - 1 | \Psi_{0(n)} \rangle$, где $\Psi_{0(n)}$ — собственная функция оператора H_0 с собственным значением $E_{0(n)}$. Используя выражение (9. 16) с $t \rightarrow \infty$ и соотношения

$$\exp(-iH_0 t) \Psi_0 = \exp(-iE_0 t) \Psi_0,$$

$$\Psi_0^* \exp(iH_0 t) = \Psi_0^* \exp(iE_0 t),$$

легко проверяемые разложением в ряд, нетрудно видеть, что интересующий нас матричный элемент пропорционален величине

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(E_{0(m)} - E_{0(n)})t - \delta|t|] dt = \\ = 2\pi\delta(E_{0(m)} - E_{0(n)}). \quad (9. 16')$$

Таким образом,

$$\langle \Psi_{0(m)} | \mathcal{S} - 1 | \Psi_{0(n)} \rangle = \\ = 2\pi\delta(E_{0(m)} - E_{0(n)}) \langle \Psi_{0(m)} | \sigma | \Psi_{0(n)} \rangle. \quad (9. 17)$$

Закон сохранения энергии проявляется, таким образом, в равенстве нулю матричного элемента (9. 17) при $E_{0(m)} \neq E_{0(n)}$. Иными словами, система в процессе своей полной эволюции из состояния $\Psi_{0(n)}$ может перейти только в состояние той же энергии. Этот вывод относится только к процессу полной эволюции системы от $-\infty$ до ∞ . В самом деле, при наличии конечных пределов интегрирования в выражении (9. 16') мы получаем не δ -функцию, а функцию, отличную от нуля при любых значениях разности $E_{0(m)} - E_{0(n)}$.

Сделаем теперь предположение о том, что состояние $\Psi_{0(n)}$ является невырожденным, т. е. что другие состояния той же энергии отсутствуют. Это предположение справедливо, вообще говоря, для основного состояния системы (по поводу возбужденных состояний см. § 21, 22). При этом необходимо ограничиться рассмотрением систем с заполненными оболочками (см. раздел 4. 3), для которых числа заполнения зависят лишь от энергии уровня. Если сравнить состояния такой системы, отвечающие одной и той же энергии, то окажется, что они отличаются самое большее перестановкой частиц. По существу же мы имеем дело с одним состоянием. Иначе обстоит дело для незаполненных оболочек. Пусть, например, сверх заполненных оболочек имеется один занятый уровень. Меняя направление спина соответствующей частицы, мы приходим к другому состоянию той же энергии (для простоты считаем, что силы не зависят от спина).

Предполагая здесь и в дальнейшем невырожденность основного состояния системы, мы видим, что из всех матричных элементов

(9. 17) отличным от нуля является лишь диагональный элемент $\langle \Psi_0(n) | \mathcal{S} | \Psi_0(n) \rangle$. Учитывая общее соотношение

$$\mathcal{S} \Psi_0(n) = \sum_m \langle \Psi_0(n) | \mathcal{S} | \Psi_0(m) \rangle \Psi_0(m),$$

приходим к соотношению

$$\mathcal{S} \Psi_0 = \langle \Psi_0 | \mathcal{S} | \Psi_0 \rangle \Psi_0. \quad (9. 18)$$

Учитывая равенство

$$\langle \Psi_0 | \mathcal{S}^+ \mathcal{S} | \Psi_0 \rangle = 1 = |\langle \Psi_0 | \mathcal{S} | \Psi_0 \rangle|^2,$$

находим

$$(\mathcal{S} \Psi_0)^* = \Psi_0^* \mathcal{S}^+ = \langle \Psi_0 | \mathcal{S} | \Psi_0 \rangle^{-1} \Psi_0^*. \quad (9. 18')$$

Полученные соотношения выражают условие «устойчивости» основного состояния системы: функция $\mathcal{S} \Psi_0$, являющаяся итогом полной эволюции системы, совпадает (с точностью до несущественного множителя) с исходной функцией Ψ_0 . Рассматриваемое состояние не меняется, таким образом, в процессе эволюции системы.

9. 6. В дальнейшем возникнет необходимость перехода от представления взаимодействия к представлению Гейзенберга и обратно. Соответствующий оператор перехода U (см. § 2)

$$\Psi_\Gamma = U \Psi_\text{в}, \quad \psi_\Gamma(x) = U \psi_\text{в}(x) U^{-1}$$

непосредственно связан с \mathcal{S} -матрицей:

$$U = \mathcal{S}(0, t) = \mathcal{S}^+(t, 0). \quad (9. 19)$$

Для доказательства достаточно вспомнить, что при $t = 0$ величины в обоих рассматриваемых представлениях совпадают. Поэтому

$$\Psi_\Gamma = \Psi_\text{в}(0) = \mathcal{S}(0, t) \Psi_\text{в}(t).$$

Соотношение (9. 19) можно вывести и иным способом, учитывая соотношение (2. 9):

$$U = \exp(iHt) \exp(-iH_0t).$$

Дифференцируя его по t , нетрудно убедиться, что U удовлетворяет тому же уравнению, что и $\mathcal{S}(0, t)$. Вместе с тем при $t = 0$ $U = 1$, т. е. полностью совпадает с $\mathcal{S}(0, t)$. Аналогичным образом можно доказать и общее соотношение

$$\mathcal{S}(t, t_0) = \exp(iH_0t) \exp[-iH(t - t_0)] \exp(-iH_0t); \quad (9. 20)$$

оно, однако, является неудобным ввиду наличия в показателе экспоненты суммы некоммутирующих операторов H_0 и H' .

Таким образом, можно написать

$$\Psi_\Gamma = \mathcal{S}(0, t) \Psi_\text{в}(t), \quad \psi_\Gamma(x) = \mathcal{S}(0, t) \psi_\text{в}(x) \mathcal{S}^{-1}(0, t). \quad (9. 21)$$

В частности, полагая $t \rightarrow -\infty$, получим

$$\Psi_\Gamma = \mathcal{S}(0, -\infty) \Psi_\text{в}(-\infty).$$

Величина Ψ_r совпадает с не зависящей от времени частью точной шредингеровской волновой функции системы. Поэтому можно написать

$$(H_0 + H' - E) S(0, -\infty) \Psi_v(-\infty) = 0, \quad (9.22)$$

где $H' = H'_v(0)$ — гамильтониан взаимодействия в представлении Шредингера; E — истинная энергия состояния.

Для нахождения точной волновой функции системы Ψ_r недостаточно знания S -матрицы; нужно еще располагать выражением для волновой функции $\Psi_v(-\infty)$. Все последующее рассмотрение в этом параграфе будет посвящено этой функции.

Исходя из соотношения (9.14), можно заключить, что $\Psi_v(-\infty)$ должна совпадать с волновой функцией нулевого приближения Ψ_0 . В самом деле, при $t \rightarrow -\infty$ гамильтониан (9.14) эффективно стремится к нулю, и корреляционное взаимодействие между частицами системы оказывается выключенным. По мере возрастания t это взаимодействие бесконечно медленно, адиабатически (при $\delta \rightarrow 0$) включается, и мы приходим к реальному состоянию системы. При $t \rightarrow +\infty$ взаимодействие также медленно выключается; по этой причине должны совпадать также функции $\Psi_v(+\infty)$ и Ψ_0 . Все эти соображения составляют содержание так называемой адиабатической гипотезы.

Существенным является вопрос о том, какое именно состояние Ψ_0 соответствует при $t \rightarrow -\infty$ данному, в частности основному состоянию Ψ_r . Можно привести некоторые доводы в пользу того, что Ψ_0 описывает также основное состояние системы, но при выключенном корреляционном взаимодействии.

С этой целью отметим, что фактор $\exp(-\delta|t|)$, входящий во взаимодействие, нарушает стационарность состояний системы. Однако при $\delta \rightarrow 0$ можно говорить о «почти стационарных» состояниях, характеристики которых бесконечно слабо зависят от времени. В частности, энергия состояния также зависит от времени, как от параметра. Эта зависимость, разумеется, отсутствует при рассмотрении конечных интервалов времени, но становится существенной при $t \rightarrow \pm\infty$.

Существует общая квантовомеханическая теорема об отсутствии пересечения уровней энергии, зависящих от одного параметра и отвечающих одинаковой симметрии [24]. Иными словами, при выполнении указанных условий уровень, который был наименьшим при одном значении параметра, останется таковым при любом другом значении этого параметра. Совершенно ясно, что эта теорема дает обоснование высказанному выше утверждению: основной при $t = 0$ уровень останется основным и при $t \rightarrow -\infty$.

Что же касается симметрии рассматриваемых состояний, то для решения этого вопроса можно использовать следующее обстоятельство. Как правило, основное состояние системы имеет максимальную совместимую с данными внешними условиями

симметрию. Поэтому рассматривать вопрос о пересечении уровней имеет смысл лишь в случае их одинаковой, именно максимальной симметрии.

9. 7. Приведенные в предыдущем разделе соображения нуждаются в дополнительном обосновании. Используя разложение S -матрицы в ряд теории возмущений, можно провести более строгое рассмотрение. Поэтому для доказательства совпадения функций $\Psi_{\nu}(\pm\infty)$ и Ψ_0 необходимо, чтобы разложение соответствующих величин в бесконечный ряд по H' качественно не меняло ситуации*.

Мы покажем, что функция $\Psi_{\nu}(-\infty)$ удовлетворяет следующему уравнению (его вывод см. в разделе 9. 8):

$$\left\{ \frac{1}{2} (H_0 + S^{-1}H_0S) + \frac{i\delta}{2} S^{-1} \frac{dS}{d\lambda} - E \right\} \Psi_{\nu}(-\infty) = 0. \quad (9. 23)$$

Входящий сюда параметр λ имеет следующий смысл: нужно заменить гамильтониан H' на $\lambda H'$, вследствие чего S -матрица станет функцией λ . После проведения всех выкладок следует положить $\lambda = 1$; величина δ здесь и ниже стремится к нулю.

Убедимся теперь в том, что функция Ψ_0 также удовлетворяет уравнению (9. 23). Воспользуемся с этой целью условием устойчивости Ψ_0 (9. 18) и уравнением $H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0$:

$$S^{-1}H_0S\Psi_0 = E_0S^{-1}S\Psi_0 = E_0\Psi_0.$$

Далее, поскольку Ψ_0 не зависит от λ , можно написать

$$S^{-1} \left(\frac{dS}{d\lambda} \right) \Psi_0 = S^{-1} \frac{\partial}{\partial \lambda} (S\Psi_0) = \frac{\partial}{\partial \lambda} [\ln \langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle] \Psi_0.$$

Чрезвычайно существенно, что оператор $S^{-1} \frac{dS}{d\lambda}$ сводится при действии на Ψ_0 к c -числу, т. е. Ψ_0 является собственной функцией этого оператора. В результате получаем условие, при выполнении которого Ψ_0 удовлетворяет уравнению (9. 23):

$$E - E_0 = -\frac{i\delta}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle. \quad (9. 24)$$

Это соотношение может само по себе служить для определения корреляционной энергии системы [78]. В дальнейшем будет показано, что $\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle$ действительно имеет при малых δ вид $\exp [L_0\delta]$, где $L_0(\lambda)$ некоторая, не зависящая от δ величина. Таким образом, разность $E - E_0$ имеет в пределе $\delta \rightarrow 0$ вполне определенную, не равную нулю величину.

Это приводит нас к выводу, что Ψ_0 и $\Psi_{\nu}(-\infty)$ отвечают одному и тому же, по условию невырожденному уровню энергии, т. е.

* Осторожность в этом смысле следует соблюдать при наличии связанного состояния, характеристики которого зависят от H' неаналитическим образом.

просто совпадают друг с другом с точностью до несущественного фазового множителя.

Окончательно выражение для волновой функции системы можно записать в виде

$$\Psi_r = \mathbf{S}(0, -\infty) \Psi_0, \quad (9.25)$$

где Ψ_0 — волновая функция основного состояния системы в приближении Хартри — Фока. Еще раз подчеркнем физический смысл этого соотношения. При $t = -\infty$ корреляционное взаимодействие отсутствует, система находится в состоянии Ψ_0 с собственным значением E_0 . При возрастании t взаимодействие медленно включается и к моменту $t = 0$ Ψ_0 переходит в Ψ_r — точную волновую функцию системы с собственным значением E .

Аналогичное соотношение существует и для моментов $t = 0$ и $t = +\infty$:

$$\Psi_r = \mathbf{S}^+(\infty, 0) \Psi_0 = \mathbf{S}(0, \infty) \Psi_0. \quad (9.26)$$

Доказывается оно тем же способом. В обоих соотношениях (9.25), (9.26) имеются еще (различные) фазовые множители. Они выпадают из окончательных результатов, имеющих прямой физический смысл.

9. 8. Приведем в заключение доказательство уравнения (9.23), основываясь на соотношениях, данных в работе [80]:

$$\left. \begin{aligned} [H_0, \mathbf{S}(0, -\infty)] &= -H' \mathbf{S}(0, -\infty) - i\delta \frac{\partial \mathbf{S}(0, -\infty)}{\partial \lambda}, \\ [H_0, \mathbf{S}(\infty, 0)] &= \mathbf{S}(\infty, 0) H' - i\delta \frac{\partial \mathbf{S}(\infty, 0)}{\partial \lambda} \end{aligned} \right\} \quad (9.27)$$

(вывод этих уравнений будет дан ниже). Умножая уравнение (9.23) слева на $\mathbf{S}(0, -\infty)$ и разбивая \mathbf{S} -матрицу согласно соотношению (9.7) на сомножители $\mathbf{S}(\infty, 0)$ и $\mathbf{S}(0, -\infty)$, нетрудно с учетом выражения (9.27) свести уравнение (9.23) к рассмотренному выше уравнению (9.22).

Докажем теперь первое соотношение (9.27) (второе выводится аналогичным образом). Рассмотрим с этой целью коммутатор $[H_0, \mathbf{S}(0, -\infty)]$, подставляя в него разложение \mathbf{S} -матрицы:

$$\begin{aligned} [H_0 \mathbf{S}(0, -\infty)] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \dots d\tau_n \times \\ &\times \exp\left(\delta \sum_1^n \tau_i\right) K_n, \end{aligned} \quad (9.28)$$

где

$$K_n = T [H_0, H'_b(\tau_1) \dots H'_b(\tau_n)].$$

Поскольку H_0 не зависит от времени, его можно внести под знак T -произведения.

Гамильтониан H_0 при коммутации с любым оператором в представлении взаимодействия приводит к дифференцированию этого оператора по времени. Поэтому можно написать

$$K_n = -in \frac{\partial}{\partial \tau_1} T [H'_v(\tau_1) \dots H'_v(\tau_n)].$$

Здесь использована, во-первых, симметрия подынтегрального выражения (9. 28) относительно перестановки точек $\tau_1 \dots \tau_n$ и, во-вторых, возможность перемены местами символов $\partial/\partial \tau$ и T в случае произведения одинаковых сомножителей. Эту возможность проще всего усмотреть в простейшем случае $n = 2$. Дифференцируя выражение (9. 12") и учитывая соотношение $\frac{\partial \theta(\pm x)}{\partial x} = \pm \delta(x)$, находим

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} T - T \frac{\partial}{\partial \tau_1} \right) H'_v(\tau_1) H'_v(\tau_2) = \delta(\tau_1 - \tau_2) [H'_v(\tau_1), H'_v(\tau_2)] = 0.$$

Здесь использовано то, что из-за наличия δ -функции возникает коммутатор двух равных операторов; это, естественно, приводит к нулевому результату.

Интегрируя выражение (9. 28) по переменной τ_1 по частям, можно написать следующее выражение для $[H_0, S(0, -\infty)]$:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^{n+1}}{(n-1)!} \left\{ \int_{-\infty}^0 d\tau_2 \dots d\tau_n \exp\left(\delta \sum_2^n \tau_i\right) \lambda^n H'_v(0) \times \right. \\ & \times T [H'_v(\tau_2) \dots H'_v(\tau_n)] - \delta \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \dots d\tau_n \times \\ & \left. \times \exp\left(\delta \sum_1^n \tau_i\right) \lambda^n T [H'_v(\tau_1) \dots H'_v(\tau_n)] \right\}. \end{aligned}$$

Первый член этого выражения совпадает с $-\lambda H'_v(0) S(0, -\infty)$.

Второй член может быть записан в виде $i\delta \lambda \frac{\partial S(0, -\infty)}{\partial \lambda}$. Соответствующее дифференцирование обеспечивает правильный численный коэффициент, добавляя в числителе необходимый множитель n .

§ 10. СВЕРТКИ ОПЕРАТОРОВ

10. 1. Прежде чем переходить к дальнейшему преобразованию выражения для S -матрицы, необходимо рассмотреть так называемые свертки операторов в представлении взаимодействия, определяемые соотношением

$$\widehat{F_1 F_2} = T(F_1 F_2) - N(F_1 F_2), \quad (10. 1)$$

где $F_{1, 2}$ — операторы поля ψ или ψ^+ *. Учитывая соотношение (9. 12) и выражение для N -произведения двух операторов, можно написать

$$\begin{aligned} & F_1 \widehat{(x_1)} F_2(x_2) = \\ & = \left\{ \begin{array}{l} \{F_1(x_1)_{(-)}, F_2(x_2)_{(+)}\} \quad t_1 > t_2, \\ -\{F_1(x_1)_{(+)}, F_2(x_2)_{(-)}\} \quad t_1 < t_2. \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (10. 2)$$

Отсюда видно, что свертки операторов $\widehat{\psi\psi}$ и $\widehat{\psi^+\psi^+}$ тождественно равны нулю (см. раздел 8. 5), а свертка операторов ψ и ψ^+ представляет собой c -число. Это последнее свойство позволяет записать с учетом выражения (8. 11)

$$\psi \widehat{(x_1)} \psi^+(x_2) = \langle \Psi_0 | T [\psi(x_1) \psi^+(x_2)] | \Psi_0 \rangle. \quad (10. 3)$$

При перемене местами свертываемых операторов свертка меняет знак:

$$\widehat{\psi\psi^+} = -\widehat{\psi^+\psi}. \quad (10. 4)$$

Приведем явное выражение для свертки (10. 3). Подставляя в соотношение (10. 2) выражения (8. 8), получим

$$\begin{aligned} \psi \widehat{(x_1)} \psi^+(x_2) &= \sum_{\nu} \chi_{\nu}^*(q_2) \chi_{\nu}(q_1) \exp [-i\varepsilon_{\nu}(t_1 - t_2)] \times \\ &\times \begin{cases} 1 - n_{\nu} & t_1 > t_2 \\ -n_{\nu} & t_1 < t_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (10. 5)$$

При $t_1 - t_2 \rightarrow -0$ свертка совпадает с одночастичной матрицей плотности системы.

Найдем уравнение, которому подчиняется свертка. Запишем с этой целью выражение (10. 3) в явном виде:

$$\begin{aligned} \psi \widehat{(x_1)} \psi^+(x_2) &\doteq \theta(t_1 - t_2) \langle \Psi_0 | \psi \psi^+ | \Psi_0 \rangle - \\ &- \theta(t_2 - t_1) \langle \Psi_0 | \psi^+ \psi | \Psi_0 \rangle. \end{aligned}$$

Учитывая уравнение (9. 2) для ψ , соотношение $\partial \theta(\pm t)/\partial t = \pm \delta(t)$ и соотношения коммутации (9. 4) при одинаковых временах, получим

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) \psi \widehat{(x_1)} \psi^+(x_2) = i\delta^4(x_1 - x_2), \quad (10. 6)$$

где $\delta^4(x) = \delta(t) \delta(\vec{x})$. Величина $G_0(x_1, x_2) = -i\psi \widehat{(x_1)} \psi^+(x_2)$ является, таким образом, функцией Грина уравнения (9. 2) для оператора $\psi(x)$. Ее называют свободной функцией Грина.

* В § 10—14 речь будет идти исключительно о представлении взаимодействия, поэтому индекс «в» у соответствующих величин будет опущен.

Функцию Грина, отвечающую условиям (10. 5), удобно подвергнуть фурье-преобразованию по разности $t_1 - t_2 = \tau^*$. Получаемая при этом величина

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau G_0(x_1, x_2) \exp(i\varepsilon\tau)$$

легко вычисляется с учетом соотношений, приведенных в приложении В:

$$\int_0^{\infty} \exp(ia\tau - \delta\tau) d\tau = \frac{i}{a + i\delta},$$

$$\int_{-\infty}^0 \exp(ia\tau + \delta\tau) d\tau = \frac{-i}{a - i\delta}.$$

В результате имеем

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon) = \sum_{\nu} \chi_{\nu}^*(q_2) \chi_{\nu}(q_1) \times$$

$$\times \left\{ \frac{1 - n_{\nu}}{\varepsilon - \varepsilon_{\nu} + i\delta} + \frac{n_{\nu}}{\varepsilon - \varepsilon_{\nu} - i\delta} \right\}.$$

Для основного состояния системы, где $n_{\nu} = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\nu})$, можно написать **

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon) = \sum_{\nu} \frac{\chi_{\nu}^*(q_2) \chi_{\nu}(q_1)}{\varepsilon - \varepsilon_{\nu} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_F)}. \quad (10. 7)$$

Для однородной системы $G_0(q_1, q_2, \varepsilon)$ зависит лишь от разности пространственных координат. Совершая фурье-преобразование по $\vec{x}_1 - \vec{x}_2 = \vec{\xi}$, имеем

$$G_0(\vec{p}, \varepsilon)_{\sigma_1 \sigma_2, \tau_1 \tau_2} = \int d\vec{\xi} G_0(q_1, q_2, \varepsilon) \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{\xi}).$$

Подставляя в соотношение (10. 7) выражение (4. 20), получим

$$G_0(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{\delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\tau_1 \tau_2}}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}} + i\delta \operatorname{sign}(p^2 - p_0^2)}. \quad (10. 8)$$

* При отсутствии переменного во времени внешнего поля функция Грина зависит только от этой разности, но не от t_1 и t_2 порознь.

** Здесь $\operatorname{sign}(x)$ — знак величины x : $\operatorname{sign}(x) = 1$ ($x > 0$), $\operatorname{sign}(x) = -1$ ($x < 0$).

Во всех приведенных здесь выражениях δ — положительная бесконечно малая величина.

10. 2. Функция Грина имеет сравнительно простой вид также в случае медленно меняющегося в пространстве самосогласованного поля. Речь идет о построении выражения для функции Грина в приближении Томаса — Ферми (см. § 5).

Запишем предварительно выражение (10. 7) в символической операторной форме. Полагая

$$(T + W) \chi_v(q) = \varepsilon_v \chi_v(q),$$

имеем

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon) = \{\varepsilon - (T + W)_{q_1} + i\delta \times \\ \times \text{sign} [(T + W)_{q_1} - \varepsilon_F]\}^{-1} \delta(q_1 - q_2). \quad (10. 9)$$

Полученное соотношение дает свободную функцию Грина в приближении Хартри — Фока; как и в случае матрицы плотности, его простота является иллюзорной ввиду некоммутации входящих в знаменатель операторов.

Если выполнены условия применимости приближения Томаса — Ферми, то этой некоммутацией можно пренебречь. Переходя к фурье-образу по разности $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$, найдем

$$G_0(\vec{x}_1, \vec{p}, \varepsilon) = \frac{\delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\tau_1 \tau_2}}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}}(x_1) + i\delta \text{sign} \left[\varepsilon_{\vec{p}}(x_1) - \varepsilon_F \right]}. \quad (10. 10)$$

Здесь \vec{x}_1 играет роль параметра, от которого слабо зависит функция G_0 .

Если одновременно можно пренебречь и обменными эффектами, то полученные соотношения еще упростятся. Вводя граничный импульс $p_0^2(x)$, связанный с $\varepsilon_{\vec{p}}(x)$ соотношением

$$\varepsilon_{\vec{p}}(x) = \frac{p^2 - p_0^2(x)}{2M} + \varepsilon_F,$$

находим

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon) = \int \frac{d^3p \exp [i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)] \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\tau_1 \tau_2}}{\varepsilon - \varepsilon_F - \frac{[p^2 - p_0^2(x_1)]}{2M} + i\delta \text{sign} [p^2 - p_0^2(x_1)]}. \quad (10. 11)$$

В том же приближении в подынтегральном выражении (10. 11) можно сделать замену $p_0^2(x_1) \rightarrow p_0^2(x_2)$:

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon) = \int \frac{d^3p \exp [i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)] \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\tau_1 \tau_2}}{\varepsilon - \varepsilon_F - \frac{[p^2 - p_0^2(x_2)]}{2M} + i\delta \text{sign} [p^2 - p_0^2(x_2)]}. \quad (10. 12)$$

В самом деле, эффективное значение разности $\vec{x}_1 - \vec{x}_2 \sim 1/\rho \sim 1/\rho_0$. При выполнении условия квазиклассичности

$$\rho_0^2(x_2) - \rho_0^2(x_1) \sim |\vec{x}_1 - \vec{x}_2| \nabla \rho_0^2(x_1) \sim \xi \rho_0^2(x_1) \ll \rho_0^2(x_1).$$

Выражениями (10. 11) и (10. 12) удобно пользоваться для расчета корреляционных эффектов в слабонеоднородных системах. Однако, как будет показано в § 15, приведенные выражения можно использовать для корреляционных расчетов при выполнении не только обычного условия квазиклассичности, но и еще одного условия, в ряде случаев более жесткого.

10. 3. Исследуем физический смысл свертки операторов.

Запишем выражение для функции Грина в виде

$$G_0(x_1, x_2) = -i \begin{cases} \langle \Psi_0 | \Psi(x_1) \Psi^+(x_2) | \Psi_0 \rangle t_1 > t_2, \\ -\langle \Psi_0 | \Psi^+(x_2) \Psi(x_1) | \Psi_0 \rangle t_1 < t_2. \end{cases}$$

Рассмотрим сначала верхнюю строчку. Оператор $\Psi^+(x_2)$, действуя на Ψ_0 , приводит к рождению частицы в точке q_2 в момент t_2 (уничтожающая часть этого оператора не дает вклада). В последующий момент t_1 эта частица уничтожается в точке q_1 , и система возвращается в исходное состояние. Во второй строчке в момент t_1 в точке q_1 рождается дырка, которая затем (в момент t_2) уничтожается в точке q_2 .

Таким образом, можно сказать, что функция Грина описывает процессы распространения: частицы из точки x_2 в x_1 и дырки в обратном направлении. Поэтому функцию Грина нередко называют функцией распространения. Это распространение носит причинный характер: рождение всегда предшествует уничтожению. Если бы вместо T -произведения стояло обычное произведение операторов, это важнейшее свойство оказалось бы утраченным.

Нетрудно видеть, что функция Грина равна с точностью до множителя матричному элементу перехода, отвечающего распространению в указанном выше смысле. Действительно, волновая функция системы с частицей в точке q_2 в момент t_2 равна, очевидно, $\Psi(x_2) = \Psi^+(x_2) \Psi_0$. Матричный элемент перехода

$$\langle \Psi^*(x_1) \Psi(x_2) \rangle t_1 > t_2$$

и есть, очевидно, функция Грина.

Распространение удобно изображать графически. Соответствующие правила входят составной частью в диаграммную технику, которая будет подробно излагаться ниже. Пространственно-временную точку x будем изображать точкой на графике (рис. 3, а), где по горизонтали слева направо проведена ось времени. Распространение частицы, описываемое G_0 , будем изображать направленной линией, соединяющей точки x_2 и x_1 ($t_2 < t_1$). Аналогично распространение дырки описывается линией, идущей от x_1 к x_2 ($t_2 > t_1$). Обе эти линии имеют общее направление

с осью времени, что соответствует причинному характеру распространения.

Большим неудобством такого изображения функции распространения является зависимость направления линии (от x_2 к x_1 или наоборот) от соотношения между временами точек x_1 и x_2 . Это неудобство легко преодолеть, принимая условно, что дырка распространяется от точки своего уничтожения к точке рождения, и направляя соответственно линию дырки (рис. 3, б) от точки x_2 к x_1 . Тем самым достигается выбор единого направления линии функции распространения для обоих случаев $t_2 < t_1$ и $t_2 > t_1$

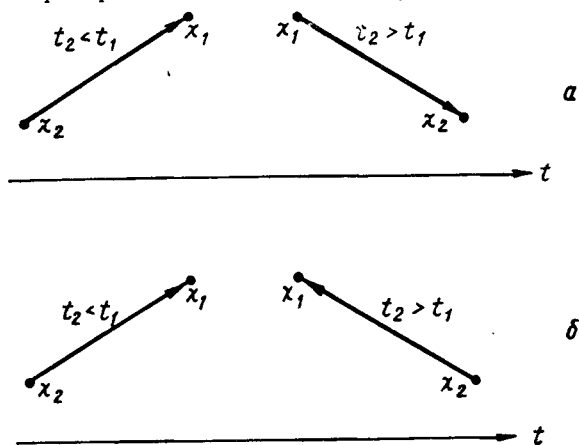


Рис. 3

совпадающего с направлением распространения частицы. Хотя при этом направление распространения дырки оказывается противоположным направлению оси времени, ни о каком противоречии с принципом причинности говорить, разумеется, нельзя, так как принятое условие имеет чисто формальный смысл. Это условие, как будет видно из дальнейшего, обеспечивает компактность графического аппарата теории.

10. 4. В заключение отметим, что широко применявшиеся в предыдущем разделе термины «рождение в точке», «уничтожение в точке», «распространение от точки к точке» не следует понимать слишком буквально.

Оператор $\psi^+(q_0)$, действуя на вакуумную функцию $\Psi_{\text{вак}}$, действительно дает состояние, отвечающее локализованной в точке q_0 частице. Этого, однако, нельзя сказать об операторе, действующем на Ψ_0 — волновую функцию системы.

Повторяя рассуждения, приведенные в разделе 3. 4, но используя выражение для оператора в виде (8. 3), приходим к выводу, что волновая функция в конфигурационном представлении оказывается равной $\sum_{\nu} (1 - n_{\nu}) \chi_{\nu}^*(q_0) \chi_{\nu}(q)$. Это выражение уже

не равно $\delta(q - q_0)$. Можно сказать, что δ -образный волновой пакет неизбежно должен был бы включать в себя состояния, которые в Ψ_0 уже заполнены частицами, что, очевидно, невозможно из-за принципа Паули.

С физической точки зрения это означает, что попытка локализовать частицу приведет к такой большой неопределенности в импульсе, что соответствующей энергии хватит на рождение одной (или многих) пар. Возникающее при этом состояние не имеет ничего общего с интересующим нас состоянием одной локализованной частицы.

Таким образом, строгая локализация частицы в теории многих частиц вообще невозможна. Но это ни в какой мере не делает непригодными предыдущие рассуждения. Для построения полевого аппарата вполне достаточно трактовать процесс распространения в том условном смысле и с теми оговорками, которые были сделаны выше.

§ 11. ГРАФИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ МАТРИЦЫ РАССЕЯНИЯ

11. 1. Вернемся к S -матрице и рассмотрим полученное в разделе 9. 3 ее выражение в виде суммы T -произведений. Это выражение неудобно по следующей причине.

Каждое из T -произведений содержит всевозможные операторы рождения и уничтожения, расположенные в самом различном порядке относительно друг друга. Поэтому при эволюции волновой функции системы во времени S -матрица, действуя на $\Psi(t_0)$, не только уничтожает те частицы, которые имелись в состоянии $\Psi(t_0)$, и рождает те частицы, которые должны присутствовать в $\Psi(t)$, но и приводит к рождению и последующему уничтожению других частиц, не имеющих никакого отношения к $\Psi(t_0)$ и $\Psi(t)$. Например, процессу перехода из начального состояния, где было две частицы, в конечное, где также имеются две частицы, отвечает не только член S -матрицы, содержащий

$$\Psi_{(+)}^+ \Psi_{(+)}^+ \Psi_{(-)} \Psi_{(-)},$$

но и член, скажем, типа

$$\Psi_{(+)}^+ \Psi_{(+)}^+ \Psi_{(-)} \Psi_{(-)} \Psi_{(-)} \Psi_{(+)}^+.$$

Здесь последние два оператора приводят к рождению и последующему уничтожению некоторой «лишней» частицы.

Эти «лишние» частицы [их называют виртуальными в отличие от реальных частиц, присутствующих в $\Psi(t_0)$ или $\Psi(t)$] играют существенную роль в интерпретации высших членов ряда теории возмущений и не могут быть устранены из аппарата теории. Однако способ их описания в терминах T -произведения неудобен.

Дело в том, что при таком описании реальные и виртуальные частицы выступают совершенно равноправно. Поэтому, например, задача об отыскании той части S -матрицы, которая отвечает данному процессу перехода реальных частиц*, становится крайне сложной ввиду наличия в выражении для S -матрицы операторов как реальных, так и виртуальных частиц.

Оказывается возможным приведение S -матрицы к такой форме, где фигурируют операторы рождения и уничтожения только реальных частиц. Что же касается виртуальных частиц, то их рождение и последующее уничтожение описываются при этом c -числами (введенными выше свертками операторов). Связанное с этим упрощение аппарата очевидно; в частности, выбор элемента S -матрицы, отвечающего данному процессу, производится непосредственно по виду входящих в эту матрицу операторов.

Для виртуальных частиц (виртуальных дырок) характерно то, что оператор их рождения обязательно стоит справа от соответствующего оператора уничтожения. В противном случае такая частица обязательно должна была бы присутствовать в начальном и конечном состояниях. Нормальное произведение операторов (см. § 8) характеризуется как раз обратным их расположением. Поэтому интересующее нас преобразование S -матрицы связано с возможностью представления T -произведения в виде суммы нормальных произведений операторов.

11. 2. Покажем, что приведение T -произведения операторов к сумме нормальных произведений всегда возможно и выполняется с помощью простых правил.

Для пары операторов мы уже имели соотношение желаемого вида [см. выражение (10. 1)]:

$$T(F_1 F_2) = N(F_1 F_2) + F_1 F_2 N(1), \quad N(1) = 1. \quad (11. 1)$$

Правила построения аналогичных соотношений в общем случае даются следующими двумя теоремами Вика.

1. T -произведение операторов поля можно представить в виде суммы нормальных произведений, выполняя свертывание всевозможных пар операторов. Общий знак каждого из таких слагаемых определяется числом перестановок операторов, необходимых для того, чтобы свертываемые операторы стояли рядом:

$$T(F_1 F_2 \dots F_n) = N(F_1 F_2 \dots F_n) + \widehat{F_1 F_2} N(F_3 \dots F_n) - \\ - \widehat{F_1 F_3} N(F_2 \dots F_n) + \dots + \widehat{F_1 F_2 F_3 F_4} N(F_5 \dots F_n) + \dots \quad (11. 2)$$

Здесь $\widehat{F_1 F_2}$ — свертка операторов F_1 и F_2 .

* S -матрица описывает всевозможные процессы перехода. Часть S -матрицы, отвечающая данному процессу, называется элементом S -матрицы процесса.

Рассмотрим соответствующий пример *:

$$T[\psi^+(1)\psi^+(2)\psi(3)\psi(4)] = N[\psi^+(1)\psi^+(2)\psi(3)\psi(4)] + \\ + iG_0(3, 1)N[\psi^+(2)\psi(4)] - iG_0(4, 1)N[\psi^+(2)\psi(3)] - \\ - iG_0(3, 2)N[\psi^+(1)\psi(4)] + iG_0(4, 2)N[\psi^+(1)\psi(3)] + \\ + G_0(3, 1)G_0(4, 2) - G_0(3, 2)G_0(4, 1).$$

Здесь использованы определения функции Грина:

$$\psi(1)\widehat{\psi^+(2)} = -\widehat{\psi^+(2)}\psi(1) = iG_0(1, 2). \quad (11. 3)$$

Свертки остальных пар операторов равны нулю.

С самого начала под знаком T -произведения могут стоять нормальные произведения.

2. Для таких смешанных T -произведений предыдущая теорема остается в силе; однако нужно опустить свертки тех операторов, которые с самого начала стояли под знаком одного и того же N -произведения.

В частности,

$$T\{N[\psi^+(1)\psi(2)]N[\psi^+(3)\psi(4)]\} = \\ = N[\psi^+(1)\psi(2)\psi^+(3)\psi(4)] - iG_0(4, 1)N[\psi(2)\psi^+(3)] + \\ + iG_0(2, 3)N[\psi^+(1)\psi(4)] + G_0(4, 1)G_0(2, 3).$$

11. 3. Перейдем к доказательству теорем Вика, используя метод индукции.

Первая теорема справедлива для двух операторов. Предположим, что она имеет силу для произведения n операторов, и рассмотрим $T(F_1 \dots F_n F_{n+1})$. Без ограничения общности можно считать, что время оператора F_{n+1} предшествует времени остальных операторов **, что позволяет переписать интересующую нас величину в виде $T(F_1 \dots F_n)F_{n+1}$.

Применяя к $T(F_1 \dots F_n)$ теорему Вика, можно привести $T(F_1 \dots F_n)F_{n+1}$ к сумме членов, каждый из которых содержит произведение операторов типа $N(\dots)F_{n+1}$. Рассмотрим характерный член такого типа $N(F_1 \dots F_k)F_{n+1}$ ($k \leq n$) и покажем, что имеет место равенство

$$N(F_1 \dots F_k)F_{n+1} - N(F_1 \dots F_k F_{n+1}) = \Sigma, \quad (11. 4)$$

где

$$\Sigma = \widehat{F_k F_{n+1}} N(F_1 \dots F_{k-1}) - \widehat{F_{k-1} F_{n+1}} N(F_1 \dots \\ \dots F_{k-2} F_k) + \dots + (-1)^k \widehat{F_1 F_{n+1}} N(F_2 \dots F_k).$$

Это утверждение равносильно теореме Вика для $T(F_1 F_2 \dots F_{n+1})$.

* Здесь и ниже цифровой аргумент заменяет собой соответствующую пространственно-временную точку: (1) = x_1 , (2) = x_2 и т. д.

** В § 9 уже упоминалось о возможности перестановки операторов под знаком T -произведения с соответствующим изменением знака. Поэтому должной перестановкой и переобозначением операторов всегда можно привести T -произведение к виду, используемому в тексте.

Для доказательства разобьем F_{n+1} на рождающую и уничтожающую части и представим левую часть выражения (11. 4) в виде

$$N(F_1 \dots F_k) F_{n+1(+)} - (-1)^k N(F_{n+1(+)} F_1 \dots F_k). \quad (11. 5)$$

Уничтожающая часть оператора F_{n+1} , как легко видеть из определения N -произведения, вообще выпадает из выражения (11. 5). Будем теперь переставлять направо оператор $F_{n+1(+)}$ во втором члене выражения (11. 5) для того, чтобы привести его к виду первого члена. При этом нужно учитывать правила перестановки

$$\{F_{n+1(+)}, F_i\} = \{F_{n+1(+)}, F_i(-)\} = \widehat{F}_i F_{n+1},$$

вытекающие из выражений (10. 2), (10. 4) и условия $t_{n+1} < t_i$.

Производя перестановку нужное число раз, можно добиться компенсации первого члена выражения (11. 5); оставшиеся члены оказываются в точности равными Σ . Этим и исчерпывается доказательство первой теоремы Вика.

Для иллюстрации рассмотрим T -произведение трех операторов $T(F_1 F_2) F_3$, которое разбивается на сумму членов:

$$N(F_1 F_2) F_3 + \widehat{F}_1 F_2 F_3 = N(F_1 F_2) F_{3(+)} + \widehat{F}_1 F_2 N(F_3).$$

Имеем

$$N(F_1 F_2) F_3 - N(F_1 F_2 F_3) = N(F_1 F_2) F_{3(+)} - N(F_{3(+)} F_1 F_2).$$

Последний член правой части можно представить в виде

$$-\widehat{F}_1 F_3 N(F_2) + \widehat{F}_2 F_3 N(F_1) - N(F_1 F_2) F_{3(+)}.$$

Таким образом, окончательно можно написать

$$T(F_1 F_2 F_3) = \widehat{F}_1 F_2 N(F_3) - \widehat{F}_1 F_3 N(F_2) + \widehat{F}_2 F_3 N(F_1) + N(F_1 F_2 F_3),$$

что, очевидно, находится в полном соответствии с выражением (11. 2).

Вторая теорема справедлива для T -произведений типа $T[N(F_1) F_2 \dots F_n]$. Будем считать ее имеющей силу для произведений $T[N(F_1 \dots F_k) F_{k+1} \dots F_n]$ и рассмотрим величину $T[N(F_1 \dots F_{k+1}) F_{k+2} \dots F_n]$. Применяя первую теорему Вика к входящему сюда N -произведению, т. е. записывая его в виде $T(F_1 \dots F_{k+1}) - \Sigma'$, представим эту величину в виде

$$T[T(F_1 \dots F_{k+1}) F_{k+2} \dots F_n] - T(\Sigma' F_{k+2} \dots F_n), \quad (11. 6)$$

где Σ' — сумма всевозможных произведений сверток операторов $F_1 \dots F_{k+1}$ на соответствующие N -произведения, причем число сомножителей в последних не превышает k . По этой причине ко второму члену выражения (11. 6) можно применить доказываемую теорему, что позволит выразить его в виде суммы произведений всевозможных сверток операторов $F_1 \dots F_{k+1}$ между собой, сверток этих операторов с остальными операторами и N -произведений оставшихся операторов. Рассматриваемый член содержит всевозможные свертки операторов $F_1 \dots F_{k+1}$, причем

каждое его слагаемое включает по крайней мере одну такую свертку.

Что касается первого члена выражения (11. 6), то символ T внутри T -произведения можно опустить *, и по первой теореме Вика придем к совокупности членов, содержащих всевозможные свертки всех без исключения операторов. Второй член выражения (11. 6) скомпенсирует те члены этой совокупности, которые содержат хотя бы одну свертку операторов $F_1 \dots F_{k+1}$ друг с другом. Таким образом, из рассматриваемого выражения действительно выпадают свертки операторов, стоящих под знаком N -произведения.

Рассмотрим в качестве иллюстрации T -произведение $T [N (F_1 F_2) F_3]$. Запишем его в виде

$$T (F_1 F_2 F_3) - \widehat{F_1} F_2 F_3$$

и применим к первому члену теорему Вика. При этом член со сверткой $\widehat{F_1} F_2$ полностью выпадает из результата.

11. 4. Применяя теорему Вика к разложению S -матрицы по T -произведениям **, можно представить последнюю в виде суммы членов, каждый из которых содержит определенное N -произведение операторов поля ψ и ψ^+ . Каждый из этих операторов в свою очередь является суммой соответствующих операторов рождения и уничтожения. Учитывая это, можно представить S -матрицу в виде суммы членов, содержащих N -произведение операторов рождения и уничтожения $\psi_{(\pm)}$, $\psi_{(\pm)}^+$. Этим членам, которые были названы выше элементами S -матрицы, удобно поставить в соответствие определенным образом построенные диаграммы (графики), описывающие соответствующий процесс перехода.

Сформулируем общие правила построения диаграммы. Элемент S -матрицы содержит следующие структурные части: операторы поля, отнесенные к соответствующим пространственно-временным точкам ***, свертки (или свободные функции Грина) и потенциалы

* Внутренний символ T излишний, так как и без того произведение операторов будет расположено в хронологическом порядке.

** В S -матрицу входят T -произведения не операторов поля, а гамильтонианов взаимодействия H'_B , содержащих произведение операторов поля, отнесенных к одному моменту времени. Применение теорем Вика к такому T -произведению не приводит в общем случае к определенному результату, так как свертка входящих в H'_B операторов неоднозначна при совпадающих временах. В рассматриваемой схеме, однако, нет никаких трудностей, поскольку, с одной стороны, выбор H' в виде (8. 1) позволяет записать H'_B в виде нормального произведения операторов [см. выражение (9. 5)]; с другой стороны, согласно второй теореме Вика, свертывать операторы внутри N -произведения не следует. Это дополнительный аргумент в пользу выбора приближения Хартри — Фока в качестве нулевого приближения теории.

*** Эти операторы называются операторами свободных концов диаграммы.

взаимодействия. Этим величинам ставятся в соответствие графические образы (рис. 4).

Каждый пространственно-временной аргумент x_i , входящий в операторы поля, свертки и потенциалы, изображается на графике точкой (узлом). Каждому оператору поля $\Psi_{(\pm)}(x_i)$, $\Psi_{(\pm)}^+(x_i)$ ставится в соответствие сплошная линия (линия свободного конца), упирающаяся одним концом в точку x_i и другим уходящая в бесконечность. Каждой свертке $iG_0(x_i, x_j)$ соответствует сплошная линия (виртуальная линия), соединяющая точки x_i и x_j . Наконец, каждому потенциалу взаимодействия $V(x_i, x_j)$ ставится в соответствие пунктирная линия (линия взаимодействия), соединяющая точки x_i и x_j .

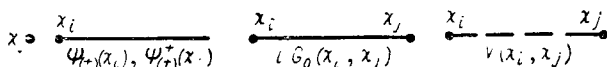


Рис. 4

Сделаем несколько общих замечаний, касающихся структуры диаграммы. То, что полное число частиц системы в процессе взаимодействия не меняется и, следовательно, остается неизменной разность между числом частиц и дырок, обуславливает отсутствие концов у сплошных линий диаграммы. Эти линии либо уходят в бесконечность, либо образуют замкнутые петли. Обрыв сплошной линии в каком-либо узле означал бы рождение или уничтожение частицы (дырки) в этом узле, что противоречило бы упомянутому выше закону сохранения.

Рассматривая n -й член разложения S -матрицы в ряд теории возмущений, нетрудно видеть, что число узлов в соответствующих диаграммах равно $2n$, а число линий взаимодействия — n . Число линий свободных концов F (обязательно четное), как и число виртуальных линий V , может быть различным для разных процессов. Однако между F , V и n имеется простая связь:

$$2V + F = 4n.$$

11. 5. В сформулированных выше правилах четырем различным операторам свободных концов $\Psi_{(\pm)}(x)$ и $\Psi_{(\pm)}^+(x)$ был поставлен в соответствие один графический образ — линия, соединяющая точку x с бесконечно удаленной точкой. Для получения взаимно однозначного соответствия между процессом перехода и диаграммой эти правила необходимо дополнить, что достигается введением понятия направления и ориентации сплошной линии графика.

Как было принято в разделе 10. 3, распространение частицы изображается линией, направленной от точки рождения частицы к точке ее уничтожения; это направление совпадает с направлением оси времени. Распространение дырки следует изображать линией,

направленной от точки уничтожения дырки к точке ее рождения, что приводит к направлению, противоположному оси времени.

Выберем раз и навсегда направление оси времени слева направо и впредь на диаграмме изображать ее не будем. Направление звеньев сплошной линии будем обозначать стрелками. Распространяя изложенные в предыдущем абзаце правила на линии свободных концов, можно на диаграмме видеть, с частицей или дыркой мы имеем дело и о рождении или уничтожении идет речь (рис. 5).

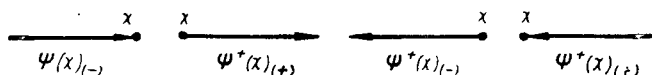


Рис. 5

Линия свободного конца, отвечающая уничтожению частицы (оператор $\psi(x)_{(-)}$), должна иметь направление, общее с осью времени, и должна кончатся в точке уничтожения x . Линия, отвечающая рождению частицы (оператор $\psi^+(x)_{(+)}$), имея то же направление, должна начинаться в точке рождения x . Линия, отвечающая уничтожению дырки (оператор $\psi^+(x)_{(-)}$), должна иметь направление, противоположное оси времени, и начинаться в точке



Рис. 6

уничтожения x . Наконец, линия, отвечающая рождению дырки (оператор $\psi(x)_{(+)}$), имея то же направление, должна кончатся в точке рождения x . Так решается задача о получении взаимно однозначного соответствия между элементом S -матрицы и диаграммой.

Направление виртуальной линии диаграммы выбирается в соответствии с правилами, сформулированными в разделе 10.3. Эти правила приводят к единому направлению звеньев сплошной линии; иными словами, никакая пара соседних звеньев не может иметь встречных направлений*. Если мы имеем дело с незамкнутой сплошной линией, то это единое направление определяется направлениями свободных концов, т. е. типом процесса. Если же сплошная линия замкнута, то возможны два противоположных

* В соответствии с законом сохранения разности числа частиц и дырок уничтожение частицы в узле обязательно сопровождается рождением частицы или уничтожением дырки в том же узле. И в том и в другом случае направление вдоль сплошной линии остается единым (рис. 6).

направления ее обхода. Оказывается, что во всех случаях элементы S -матрицы содержат пары членов, отвечающих диаграммам с двумя противоположными направлениями обхода замкнутых петель. Таким образом, и в этом случае никакой неоднозначности в применении обсуждаемых правил не возникает.

Говоря о виртуальных линиях диаграммы, необходимо заметить, что ввиду интегрирования по координатам и времени каждого узла соотношение между временами, входящими в функцию распространения, может быть произвольным. Соответственно может быть различной и ориентация виртуальной линии относительно оси времени* (рис. 7). Принято, однако, изображать на графике наиболее простую, неизломанную конфигурацию линий. Последующее интегрирование по координатам и времени приведет к автоматическому учету всех возможностей такого рода (подробнее см. § 12).

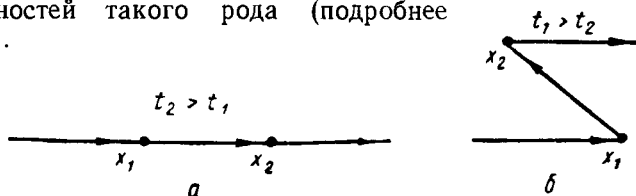


Рис. 7

В заключение отметим, что линию взаимодействия, концы которой отвечают равным временам, естественно направлять перпендикулярно оси времени. В следующем параграфе мы подробно рассмотрим примеры, иллюстрирующие изложенные правила.

§ 12. ПРОЦЕССЫ НИЗШЕГО ПОРЯДКА

12. 1. Переходим к систематическому изучению элементов S -матрицы низшего порядка. Будем пока для простоты считать, что V является не оператором, а c -числом.

Начнем с процессов первого порядка по H' ($n = 1$). Согласно выражению (9. 15):

$$\left. \begin{aligned} S_1 &= -\frac{i}{2} \int d1 d2 \exp(-\delta |t_1|) V(1, 2) \tau_1, \\ \tau_1 &= TN[\psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1)]. \end{aligned} \right\} \quad (12. 1)$$

Здесь символ $d1$ означает $d^4x_1 = dq_1 dt_1$. Согласно второй теореме Вика, это T -произведение можно заменить N -произведением соответствующих операторов поля. Разлагая последнее на сумму членов, каждый из которых является произведением операторов

* Изображенный на рис. 7, *a* процесс содержит виртуальную частицу, на рис. 7, *b* — виртуальную дырку (в точке x_2 рождается пара, частица уходит в будущее, дырка аннигилирует с первоначальной частицей).

рождения и уничтожения, приходим к совокупности $2^4 = 16$ членов. Соответствующие диаграммы удобно разделить на следующие три класса.

1. Процессы рассеяния, отвечающие двум операторам рождения и двум уничтожения:

а) $\psi^+(1)_{(+)} \psi^+(2)_{(+)} \psi(2)_{(-)} \psi(1)_{(-)}$;

б) $\psi(1)_{(+)} \psi(2)_{(+)} \psi^+(2)_{(-)} \psi^+(1)_{(-)}$;

в) $-\psi^+(1)_{(+)} \psi(2)_{(+)} \psi^+(2)_{(-)} \psi(1)_{(-)}$;

г) $-\psi^+(2)_{(+)} \psi(1)_{(+)} \psi^+(1)_{(-)} \psi(2)_{(-)}$;

д) $\psi^+(1)_{(+)} \psi(1)_{(+)} \psi^+(2)_{(-)} \psi(2)_{(-)}$;

е) $\psi^+(2)_{(+)} \psi(2)_{(+)} \psi^+(1)_{(-)} \psi(1)_{(-)}$.

Диаграмма на рис. 8, а описывает процесс рассеяния частицы на частице, на рис. 8, б — дырки на дырки. Четыре следующих

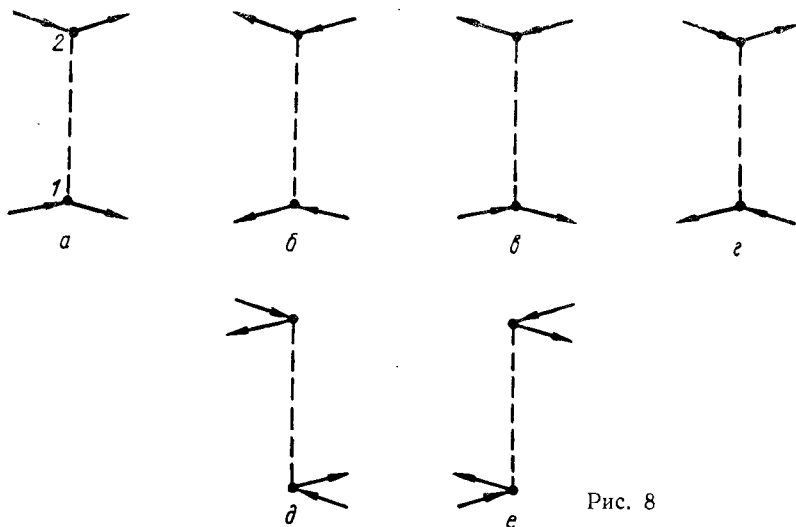


Рис. 8

диаграммы (см. рис. 8, в — е) отвечают рассеянию частицы на дырке. При этом диаграммы на рис. 8, в, г отвечают простому рассеянию, когда частица и дырка, уничтожаясь в соответствующем узле, «возрождаются» каждая в том же узле. Оба элемента S -матрицы, соответствующие этим диаграммам, очевидно, одинаковы, так как отличаются лишь заменой переменных интегрирования. Диаграммы на рис. 8, д, е отвечают так называемому аннигиляционному рассеянию частицы на дырке: рассеиваемая пара сначала аннигилирует в одном узле, потом «возрождается» в другом. Обе эти диаграммы также вносят одинаковый вклад.

2. Процессы с участием одной пары, отвечающие трем операторам рождения и одному поглощения (и наоборот). Таких диаграмм восемь; мы рассмотрим типичные (рис. 9):

- а) $\psi^+(1)_{(+)} \psi^+(2)_{(+)} \psi(2)_{(+)} \psi(1)_{(-)}$;
 б) $\psi^+(1)_{(+)} \psi^+(2)_{(-)} \psi(2)_{(-)} \psi(1)_{(-)}$.

Диаграмма на рис. 9, а отвечает рождению пары частиц, т. е. возбуждению системы за счет взаимодействия с этой частицей; на рис. 9, б соответствует аннигиляции пары за счет взаимодействия с частицей. Остальные 6 диаграмм этого класса описывают аналогичные процессы с участием дырки, а также включают в себя дублирующие диаграммы с заменой $1 \leftrightarrow 2$.

3. Процессы с рождением или аннигиляцией двух пар (четыре оператора рождения или уничтожения):

- а) $\psi^+(1)_{(+)} \psi^+(2)_{(+)} \psi(2)_{(+)} \psi(1)_{(+)}$;
 б) $\psi^+(1)_{(-)} \psi^+(2)_{(-)} \psi(2)_{(-)} \psi(1)_{(-)}$.

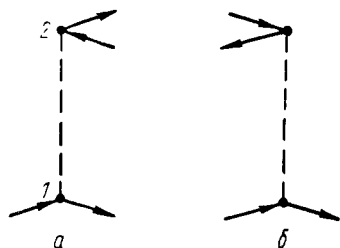


Рис. 9

Диаграмма на рис. 10, а отвечает самовозбуждению системы, при котором рождаются две пары; диаграмма на рис. 10, б — аннигиляции двух пар*.

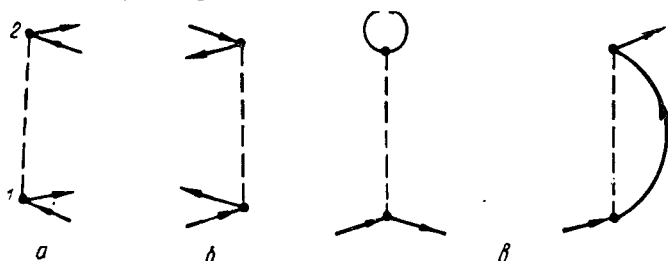


Рис. 10

12. 2. S-матрица во втором порядке теории возмущений имеет вид:

$$\left. \begin{aligned}
 S_2 = -\frac{1}{8} \int d1 d2 d3 d4 \exp [-\delta (|t_1| + |t_2|)] \times \\
 \times V(1, 2) V(3, 4) \tau_2, \\
 \tau_2 = T \{ N [\psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1)] \times \\
 \times N [\psi^+(3) \psi^+(4) \psi(4) \psi(3)] \}.
 \end{aligned} \right\} \quad (12. 2)$$

* Если бы в качестве гамильтониана возмущения мы выбрали не выражение (8. 1), а полный гамильтониан взаимодействия H_I , то нам пришлось бы рассматривать еще диаграммы, типа изображенных на рис. 10, в. То же замечание относится и к диаграммам высшего порядка.

Применяя теоремы Вика к этому T -произведению, получим сумму членов, содержащих различное число сверток (от 0 до 4). Общее число элементов матрицы S_2 достигает большой величины. Рассмотрим лишь наиболее типичные.

1. Диаграммы без сверток. Им отвечает член $\tau_2 = N[\psi^+(1) \times \psi(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi^+(3) \psi(3) \psi^+(4) \psi(4)]$, включающий $2^8 = 256$ элементов. Эти диаграммы описывают два независимых процесса первого порядка (рис. 11).

2. Диаграммы с одной сверткой. Эту свертку можно выбрать восемью способами. С помощью замен переменных $1 \leftrightarrow 2$, $3 \leftrightarrow 4$ и одновременной замены $1 \leftrightarrow 3$, $2 \leftrightarrow 4$ убеждаемся, что все эти восемь слагаемых дают одинаковый вклад в S_2 . Соответствующая часть T -произведения приводится тем самым к виду

$$\tau_2 = 8iG_0(3, 1) N[\psi^+(3) \psi(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi^+(4) \psi(4)]. \quad (12. 3)$$

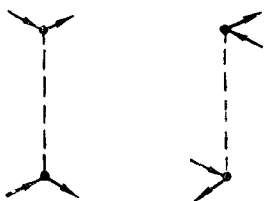


Рис. 11

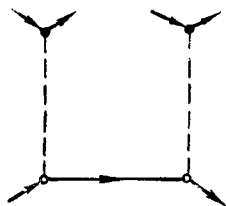


Рис. 12

Это N -произведение разбивается на $2^6 = 64$ отдельных члена. Типичный из них отвечает рассеянию трех частиц друг на друге (рис. 12). Кроме того, сюда входит рождение пары при рассеянии двух частиц, рождение двух пар частиц и т. д.

3. Диаграммы с двумя свертками. Учитывая всевозможные свертки и применяя указанную выше замену переменных, найдем

$$\begin{aligned} \tau_2 = & 4iG_0(3, 1) iG_0(4, 2) N[\psi^+(3) \psi(1) \psi^+(4) \psi(2)] + \\ & + 8iG_0(2, 3) iG_0(3, 1) N[\psi^+(2) \psi(1) \psi^+(4) \psi(4)] + \\ & + 4iG_0(2, 4) iG_0(3, 1) N[\psi^+(2) \psi(4) \psi^+(3) \psi(1)] - \\ & - 4iG_0(2, 3) iG_0(3, 2) N[\psi^+(1) \psi(1) \psi^+(4) \psi(4)]. \end{aligned} \quad (12. 4)$$

Наряду с другими процессами сюда включены процессы рассеяния частицы на частице во втором порядке теории возмущений. Рассмотрим их подробнее (рис. 13).

Первое слагаемое выражения (12. 4) отвечает прямому рассеянию. Обе рассеиваемые частицы либо сначала поглощаются, затем испускаются (при $t_1 < t_3$, рис. 13, а), либо сначала испускаются, потом поглощаются (при $t_3 < t_1$, см. рис. 13, д). Согласно принятому выше условию, на графике изображается лишь простейшая ситуация, т. е. диаграмма рис. 13, д отбрасывается.

Процессы, отвечающие второму и третьему слагаемым выражения (12. 4) (см. рис. 13, б и в), интерпретируются более сложным

образом. В момент $t_1 = t_2$ рождается пара, причем частица уходит в качестве конечного продукта реакции, а дырка аннигилирует с одной из первоначальных частиц. Другая начальная частица испытывает простое рассеяние. Наконец, последний член выра-

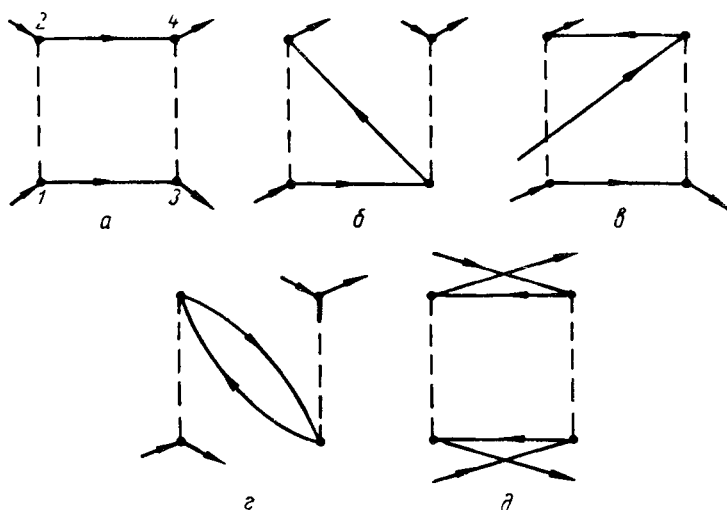


Рис. 13

жения (12. 4) описывает процесс, подобный процессу рассеяния первого порядка, но содержит одну виртуальную пару (см. рис. 13, г).

4. Диаграммы с тремя свертками. Несложные вычисления дают

$$\tau_2 = -8iG_0(2, 4) iG_0(4, 2) iG_0(3, 1) N [\psi^+(3) \psi(1)] + 8iG_0(2, 3) iG_0(3, 1) iG_0(4, 2) N [\psi^+(4) \psi(1)]. \quad (12. 5)$$

Соответствующие диаграммы изображены на рис. 14. Отвечающие им процессы состоят в том, что частица (или дырка) распространяется, взаимодействуя с частицами системы. Именно, она возбуждает систему, рождая пару, которая затем аннигилирует, после чего остается опять одна частица.

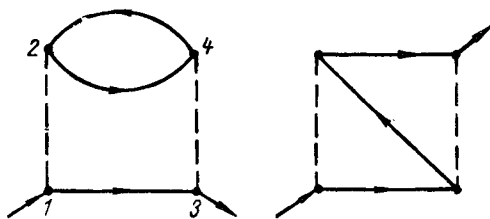


Рис. 14

5. Диаграмма с четырьмя свертками:

$$\tau_2 = 2iG_0(1, 3) iG_0(3, 1) iG_0(2, 4) iG_0(4, 2) - 2iG_0(1, 3) iG_0(2, 4) iG_0(4, 1) iG_0(3, 2). \quad (12. 6)$$

Диаграммы, отвечающие этим выражениям, изображены на рис. 15. Это так называемые вакуумные переходы: рождаются две пары, которые затем аннигилируют.

12. 3. Построенные выше выражения для элементов S -матрицы были записаны в координатном представлении: участвующие в соответствующем процессе частицы уничтожались и затем рождались в определенных пространственно-временных точках 1, 2, 3, 4. Эта форма S -матрицы удобна для рассмотрений общего характера; однако для практических приложений целесообразнее перейти к энергетическому представлению, отвечающему такому описанию процесса, при котором частицы находятся в состояниях с определенной энергией [их волновая функция равна $\chi_v(q)$].

Для этого используем выражения для операторов поля и функции Грина:

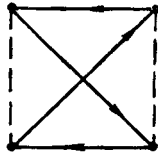
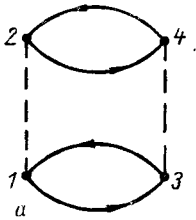


Рис. 15

$$\Psi(x) = \sum_v A_v \chi_v(q) \exp(-i\varepsilon_v t)$$

и

$$G_0(1, 2) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \exp[-i\varepsilon(t_1 - t_2)] \times \sum_v \chi_v^*(q_2) \chi_v(q_1) G_{0v}(\varepsilon),$$

где

$$A_v = \begin{cases} a_v(\varepsilon_v > \varepsilon_F) \\ b_v^+(\varepsilon_v < \varepsilon_F) \end{cases}, \quad G_{0v}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_v + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_v - \varepsilon_F)}. \quad (12.7)$$

Кроме того, нам понадобится выражение для матричного элемента потенциала взаимодействия (см. раздел 3. 7):

$$\langle \sigma\lambda | V | \nu\mu \rangle = \int dq dq' \chi_\nu^*(q) \chi_\mu^*(q') V(q, q') \chi_\lambda(q') \chi_\sigma(q). \quad (12.8)$$

Подставим эти выражения в элемент S -матрицы S_1 . Интегрирование по t_1, t_2 дает с учетом $V(1, 2) = V\delta(t_1 - t_2)$ функцию $2\pi\delta(\varepsilon_{\nu_1} + \varepsilon_{\nu_2} - \varepsilon_{\nu_3} - \varepsilon_{\nu_4})$, обеспечивающую сохранение энергии в рассматриваемом процессе. Интегрирование по пространственным координатам приводит к матричному элементу (12. 8). В результате получаем

$$S_1 = -\frac{i}{2}(2\pi) \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} \langle \nu_1 \nu_2 | V | \nu_3 \nu_4 \rangle \delta(\varepsilon_{\nu_1} + \varepsilon_{\nu_2} - \varepsilon_{\nu_3} - \varepsilon_{\nu_4}) N(A_{\nu_3}^+ A_{\nu_1} A_{\nu_4}^+ A_{\nu_2}). \quad (12.9)$$

Это выражение описывает целый ряд процессов: рассеяние частицы на частице, частицы на дырке и т. д., которым также можно поставить в соответствие диаграммы (рис. 16). Их единственное отличие от рассмотренных диаграмм состоит в отсутствии пространственно-временных точек; вместо этого линии свободных концов приобретают индексы соответствующих состояний.

Переходим к процессам второго порядка. Повторяя несколько более сложные, но вполне аналогичные произведенным выше выкладки, получим следующее выражение для элемента S-матрицы процессов, рассмотренных в разделе 12. 2:

$$S_2 = -\frac{1}{8} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} \sum_{\mu_1 \mu_2} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 iG_{0\mu_1}(\varepsilon_1) iG_{0\mu_2}(\varepsilon_2) \times \\ \times K_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} N(A_{\nu_3}^+ A_{\nu_1} A_{\nu_4}^+ A_{\nu_2}), \quad (12.10)$$

где

$$K = 4\delta(\varepsilon_{\nu_1} + \varepsilon_{\nu_2} - \varepsilon_1 - \varepsilon_2) \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_{\nu_3} - \varepsilon_{\nu_4}) \times \\ \times \langle \nu_1 \nu_2 | V | \mu_1 \mu_2 \rangle \langle \mu_1 \mu_2 | V | \nu_3 \nu_4 \rangle + \\ + 8\delta(\varepsilon_{\nu_1} + \varepsilon_2 - \varepsilon_{\nu_3} - \varepsilon_1) \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_{\nu_2} - \varepsilon_2 - \varepsilon_{\nu_4}) \times \\ \times \langle \nu_1 \mu_2 | V | \mu_1 \nu_3 \rangle \langle \mu_1 \nu_2 | V | \mu_2 \nu_4 \rangle + \\ + 4\delta(\varepsilon_{\nu_1} + \varepsilon_2 - \varepsilon_{\nu_4} - \varepsilon_1) \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_{\nu_2} - \varepsilon_2 - \varepsilon_{\nu_3}) \times \\ \times \langle \nu_1 \mu_2 | V | \mu_1 \nu_4 \rangle \langle \nu_2 \mu_1 | V | \mu_2 \nu_3 \rangle - \\ - 4\delta(\varepsilon_{\nu_1} + \varepsilon_1 - \varepsilon_{\nu_3} - \varepsilon_2) \delta(\varepsilon_2 + \varepsilon_{\nu_2} - \varepsilon_1 - \varepsilon_{\nu_4}) \times \\ \times \langle \nu_1 \mu_1 | V | \nu_3 \mu_2 \rangle \langle \mu_2 \nu_2 | V | \mu_1 \nu_4 \rangle. \quad (12.11)$$

Диаграммы, отвечающие этим четырем процессам (рис. 17), вполне аналогичны диаграммам рис. 13. Заметим, что $\mu_1 \varepsilon_1$ и $\mu_2 \varepsilon_2$ представляют собой индексы состояния и энергии виртуальных частиц.

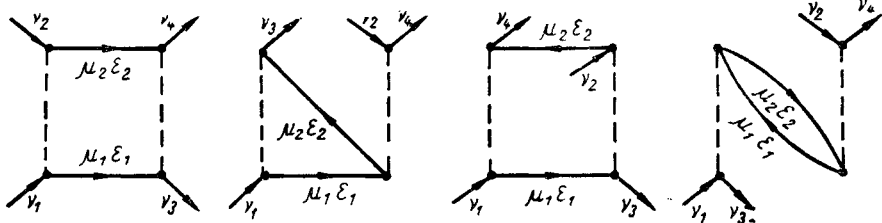


Рис. 17

Рассмотрим еще процесс распространения частицы (рис. 18):

$$S_2 = -\frac{1}{8(2\pi)} \sum_{\nu_1 \nu_2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 iG_{0\mu_1}(\varepsilon_1) iG_{0\mu_2}(\varepsilon_2) \times \\ \times iG_{0\mu_3}(\varepsilon_3) (-8) \delta(\varepsilon_{\nu_1} + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2) \delta(\varepsilon_1 + \\ + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_{\nu_2}) \times \{ \langle \nu_1 \mu_3 | V | \mu_1 \mu_2 \rangle \langle \mu_1 \mu_2 | V | \nu_2 \mu_3 \rangle - \\ - \langle \nu_1 \mu_3 | V | \mu_1 \mu_2 \rangle \langle \mu_1 \mu_2 | V | \mu_3 \nu_2 \rangle \} N(A_{\nu_2}^+ A_{\nu_1}). \quad (12.12)$$

Из последних двух соотношений видно, что и здесь фактически содержатся необходимые законы сохранения энергии, соблюдаю-

щиеся на каждой линии взаимодействия диаграммы. В отличие от «старой» теории возмущений закон сохранения энергии здесь выполняется как для реальных, так и для виртуальных частиц. Это достигается за счет нарушения «жесткой» связи между энергией виртуальной частицы ϵ , входящей в функцию Грина $G_{0\nu}(\epsilon)$, и величиной ϵ_ν (в пространственно-однородном случае $\epsilon \neq p^2/2M$). Указанное обстоятельство является одним из факторов, обеспечивающих простую структуру членов ряда полевой теории возмущений.

12. 4. Полученные результаты не зависят от скорости включения взаимодействия δ в пределе $\delta \rightarrow 0$; это свойство присуще всем диаграммам, имеющим свободные концы. Иначе обстоит дело

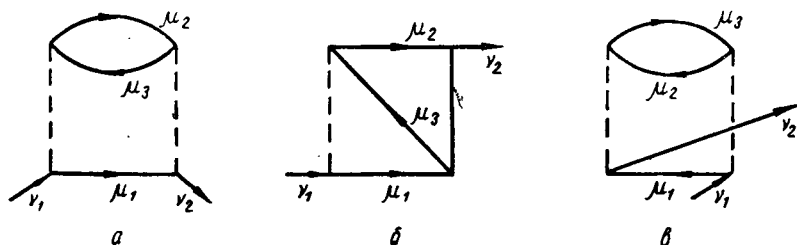


Рис. 18

для диаграмм вакуумных переходов, к рассмотрению которых мы переходим.

Подставляя в выражения (12. 2) и (12. 6) разложение для функции G_0 , можно получить выражение для соответствующего элемента S -матрицы в энергетическом представлении. Мы ограничимся рассмотрением входящих туда интегралов по t .

Первый член выражения (12. 6), отвечающий диаграмме рис. 15, а, содержит интегралы вида

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \exp [-\delta |t_1| - it_1 (\epsilon_1 - \epsilon_2 + \epsilon_3 - \epsilon_4)] \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \exp [-\delta |t_3| - it_3 (\epsilon_2 + \epsilon_4 - \epsilon_1 - \epsilon_3)].$$

Несложное вычисление (см. приложение В) дает

$$I = \left[\frac{2\delta}{\delta^2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2 + \epsilon_3 - \epsilon_4)^2} \right]^2.$$

В пределе $\delta \rightarrow 0$ заключенное в квадратные скобки выражение стремится с точностью до множителя к $\delta (\epsilon_1 - \epsilon_2 + \epsilon_3 - \epsilon_4)$. Поэтому величина I в пределе $\delta \rightarrow 0$ стремится к ∞ . Аккуратно выделяя указанную особенность, имеем

$$I \sim \frac{1}{\delta} \delta (\epsilon_1 + \epsilon_3 - \epsilon_2 - \epsilon_4). \quad (12. 13)$$

Аналогично второй член выражения (12. 6) дает

$$I \sim \frac{1}{\delta} \delta (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4). \quad (12. 14)$$

Остающаяся δ -функция устраняется при последующем интегрировании по ϵ .

Полученные результаты носят весьма общий характер. Пусть рассматривается диаграмма n -го порядка, имеющая свободные концы. Тогда $n - 1$ входящих в соответствующий элемент S -матрицы δ -функций, выражающих закон сохранения энергии, устраняются при последующем интегрировании по ϵ . Остающаяся δ -функция выражает закон сохранения энергии для свободных концов (для диаграммы в целом).

Любая диаграмма, не имеющая свободных концов, может быть получена из соответствующей диаграммы со свободными концами замыканием последних друг на друга, т. е. отождествлением энергий выходящих и входящих линий. При этом закон сохранения энергии для свободных концов выполняется тождественно и соответствующая δ -функция будет иметь нулевой аргумент*. Более строгое рассмотрение приведет к особенности $\sim 1/\delta$.

Таким образом, любая диаграмма вакуумного перехода имеет особенность типа $1/\delta$. Это обстоятельство существенно с точки зрения однозначности величины (9. 24).

§ 13. ПРАВИЛА ФЕЙНМАНА

13. 1. Рассмотренные примеры позволяют сформулировать общие правила построения элемента S -матрицы, отвечающего данному процессу.

Элемент S -матрицы n -го порядка содержит следующие составные части: нормальное произведение операторов поля, n -кратное произведение потенциалов взаимодействия V , произведение сверток операторов iG_0 и некоторый численный коэффициент.

Нормальное произведение операторов рождения и уничтожения будем брать с тем знаком, с которым оно входит в выражение

$$N(\psi_a^+ \psi_a \psi_b^+ \psi_b \dots),$$

где индексы « a » относятся к свободным концам одной из сплошных линий, « b » — другой и т. д. Относительное расположение групп $\psi_a^+ \psi_a$, $\psi_b^+ \psi_b$ не играет, очевидно, роли.

Необходимо принять во внимание операторные свойства потенциала V с целью правильного его расположения в выражении для элемента S -матрицы. Во всех примерах, которые нам придется

* Например, рассмотренная выше диаграмма без свободных концов может быть получена из диаграммы рассеяния второго порядка приравниванием ϵ_{ν_1} и ϵ_{ν_2} , ϵ_{ν_3} и ϵ_{ν_4} (см. рис. 17). При этом, как следует из выражения (12. 10), возникает $\delta(\epsilon_{\nu_1} + \epsilon_{\nu_2} - \epsilon_{\nu_3} - \epsilon_{\nu_4}) = \delta(0)$.

рассматривать, можно считать, что потенциал не содержит операторов импульса. Единственный из числа рассматриваемых в книге случай, где приходится иметь дело с зависящим от импульса потенциалом, это псевдопотенциал отталкивания в ядерных силах. Однако соответствующие члены имеют высший порядок малости и их достаточно учесть лишь в приближении Хартри — Фока; к S -матрице они не имеют отношения.

Поэтому в дальнейшем мы будем считать, что потенциал V является самое большое матрицей относительно дискретных переменных. Эта матрица «зацепляется» либо с операторами свободных концов ψ_{\pm} , ψ_{\pm}^{\dagger} , либо с функциями Грина, зависящими от соответствующих аргументов.

Найдем величину численного коэффициента в элементе S -матрицы. Из общего выражения (9. 13) возникает множитель $\frac{(-i)^n}{2^n n!}$ в члене n -го порядка. Далее, как видно из результатов, полученных в § 12, возникает еще один целочисленный коэффициент k , связанный с тем, что может появиться совокупность членов, отличающихся только обозначением переменных интегрирования. Определим величину этого коэффициента [78].

Рассмотрим какую-либо диаграмму общего вида и найдем количество способов обозначения ее узлов. Прежде всего, можно переставить местами аргументы, стоящие по краям каждой из n линии взаимодействия. Это дает 2^n возможностей. Далее, можно одновременно поменять местами аргументы разных линий взаимодействий, что можно сделать $n!$ способами. Итого мы имеем $2^n n!$ различных способов обозначения аргументов элементов S -матрицы.

Однако при некоторых заменах переменных может оказаться, что само подынтегральное выражение не меняется. Это может происходить при наличии определенной симметрии диаграммы. Обозначая через κ число таких эквивалентных способов обозначений и учитывая, что при фактическом вычислении элементов S -матрицы члены с одинаковыми подынтегральными выражениями вообще не появляются, находим $k = 2^n n! / \kappa$.

Величину κ можно определить непосредственно из рассмотрения диаграммы. Обратимся к рассмотренным в § 12 конкретным процессам. При $n = 1$ $k = 2/\kappa$. Диаграммы рис. 8, а и б и рис. 10, а и б в точности переходят сами в себя при замене $1 \rightleftarrows 2$. Поэтому для них $\kappa = 2$ и $k = 1$. Для остальных диаграмм первого порядка вид их при замене $1 \rightleftarrows 2$ меняется: диаграмма «в» на рис. 8 переходит в «г»; «д» — в «е». Поэтому в этих случаях $\kappa = 1$ и $k = 2$.

Перейдем к более сложному случаю процессов второго порядка, где $k = 8/\kappa$. Для диаграммы рис. 12 не существует преобразования, оставляющего ее неизменной. Поэтому $\kappa = 1$ и $k = 8$. Для диаграммы «а» рис. 13 такая замена существует — это одновременная замена $1 \rightleftarrows 2$, $3 \rightleftarrows 4$, откуда $\kappa = 2$ и $k = 4$. Для диаграммы «б» $\kappa = 1$ и $k = 8$. Для диаграммы «в» замена $1 \rightleftarrows 4$,

$2 \rightleftharpoons 3$ оставляет ее неизменной, откуда $\kappa = 2$ и $k = 4$. Наконец, замена $2 \rightleftharpoons 3$ также не меняет диаграммы «g»; и в этом случае $\kappa = 2$. Все это, очевидно, находится в полном соответствии с выражением (12. 4).

Для диаграмм рис. 14 $\kappa = 1$ и $k = 8$. Для диаграмм рис. 15 имеется две замены, оставляющие диаграмму неизменной. Это $1 \rightleftharpoons 3$, $2 \rightleftharpoons 4$ и $1 \rightleftharpoons 2$ и $3 \rightleftharpoons 4$. Поэтому $\kappa = 4$ и $k = 2$.

В заключение остановимся на вопросе о знаке рассматриваемого численного коэффициента. Как видно из результатов § 12, дополнительный знак (—) появляется в S тогда, когда имеется нечетное число замкнутых петель. Это не должно вызывать удивления, так как в замкнутой петле мы имеем дело со свертками противоположного направления, например в простейшем случае

$$\psi(1)\psi^+(2) \text{ и } \psi^+(2)\psi(1), \text{ а их произведение равно } -(iG_0) (iG_0).$$

Таким образом, окончательное выражение для численного коэффициента в элементе S -матрицы имеет вид

$$\frac{(-i)^n}{\kappa} (-1)^m,$$

где m — число замкнутых петель.

13. 2. Теперь можно сформулировать правила построения выражения для элемента S -матрицы. Эти правила впервые установил Фейнман для квантовой электродинамики.

Для построения выражения элемента S -матрицы необходимо:

1. Графически изобразить все возможные топологически различные диаграммы интересующего нас процесса*.

Выражение для элемента S -матрицы представится в виде суммы членов, каждый из которых отвечает одной из указанных диаграмм. В дальнейшем речь идет об отдельной диаграмме.

2. Определить число κ замен аргументов, не изменяющих вида диаграммы. Численный коэффициент искомого выражения имеет вид

$$\frac{(-i)^n}{\kappa} (-1)^m,$$

где m — число замкнутых петель на диаграмме.

3. Свободным концам диаграммы поставить в соответствие операторы $\psi(x)_{(-)}$ (уничтожение частицы в точке x), $\psi^+(x)_{(+)}$ (рождение частицы в точке x), $\psi(x)_{(+)}$ (рождение дырки в точке x), $\psi^+(x)_{(-)}$ (уничтожение дырки в точке x).

В искомое выражение будет входить нормальное произведение

$$N(\psi_{(\pm)a}^{\pm} \psi_{(\pm)a} \psi_{(\pm)b}^{\pm} \psi_{(\pm)b} \dots),$$

* Речь идет о существенно различных диаграммах, не переводимых друг в друга заменой обозначений, непрерывной деформацией графика и т. п. Так, диаграммы «a» — «g» рис. 13 являются топологически различными, а «a» и «d» — одинаковыми. Топологически совпадают также диаграммы «e» и «g», «d» и «e» рис. 8, а также «a» и «e» рис. 18.

где одинаковыми индексами « a », « b » и т. д. обозначены операторы, относящиеся к одной и той же сплошной линии.

4. Каждой виртуальной линии диаграммы, идущей от точки x к точке x' , поставить в соответствие свертку $iG_0(x', x)^*$.

5. Каждой линии взаимодействия, соединяющей точки x и x' , поставить в соответствие оператор $V(x, x')$, действующий на входящие в рассматриваемое выражение величины

$$\Psi(x), \Psi(x'), G_0(x, x_i), G_0(x', x_i).$$

6. Каждому узлу взаимодействия x поставить в соответствие интеграцию $\int d^4x = \int dq dt$.

В релятивистской теории поля сюда прибавлялось еще одно правило (теорема Фарри): диаграммы с замкнутыми петлями, содержащими нечетное число звеньев, учитывать не нужно. В данном случае, однако, эта теорема не имеет места ввиду отсутствия свойства зарядовой симметрии, на котором основан ее вывод (см. § 9).

Сформулированные правила весьма удобны при построении выражения для элемента S -матрицы любого порядка.

13. 3. Приведенные правила Фейнмана относятся к координатному представлению. Рассмотрим теперь соответствующие правила в энергетическом представлении.

1. Остается в силе. Необходимо только расставить на диаграмме индексы состояния и энергии свободных концов ν , ϵ_ν и виртуальных линий μ , ϵ . Направление линий свободных концов выбирается в соответствии с типом процесса (поглощение или испускание) и типом объекта (частица или дырка). Направление виртуальной линии должно обеспечивать единое направление вдоль сплошной линии.

2. Остается в силе.

3. Остается в силе, но операторы поля заменяются соответствующими операторами рождения или уничтожения, причем оператор частицы берется при $\epsilon_\nu > \epsilon_F$, дырки — при $\epsilon_\nu < \epsilon_F$.

4. Каждой виртуальной линии, имеющей индексы μ и ϵ , ставится в соответствие

$$\frac{i}{2\pi} G_{0\mu}(\epsilon) = \frac{i}{2\pi [\epsilon - \epsilon_\mu + i\delta \operatorname{sign}(\epsilon_\mu - \epsilon_F)]}.$$

По μ производится суммирование, по ϵ — интегрирование.

5. Каждой линии взаимодействия, к которой подходят линии с индексами состояния « a » и « b » и от которой отходят линии с индексами состояния « c » и « d », ставится в соответствие матричный элемент

$$\langle ab | V | cd \rangle = \int dq dq' \chi_c^*(q) \chi_d^*(q') V \chi_b(q') \chi_a(q).$$

* Порядок следования аргументов функций G_0 противоположен направлению виртуальной линии.

При этом индексы « a », « c » и « b », « d » отвечают попарно одной и той же сплошной линии. Кроме того, каждой линии взаимодействия ставится в соответствие

$$2\pi\delta(\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_c - \varepsilon_d).$$

13. 4. Особо следует остановиться на случае пространственно-однородной системы, для которой индексы μ и ν сводятся к импульсу \vec{p} и дискретным индексам, обозначаемым через q . Энергия $\varepsilon_{\vec{p}}$ зависит только от импульса.

Правило 4 предыдущего раздела может быть переформулировано следующим образом: каждой виртуальной линии отвечает

$$i \sum_q \int d^4p \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F)}.$$

Здесь мы перешли от суммирования по импульсам к интегрированию, а это привело к появлению лишнего фактора $(2\pi)^{-3}$.

Волновые функции χ_ν имеют в рассматриваемом случае вид плоских волн. Подстановка их в матричный элемент \mathbf{V} дает

$$\begin{aligned} \langle ab | \mathbf{V} | cd \rangle &= (2\pi)^3 \delta(\vec{p}_a + \vec{p}_b - \vec{p}_c - \vec{p}_d) \times \\ &\times \langle \varrho_a \varrho_b | v(\vec{p}_c - \vec{p}_a) | \varrho_c \varrho_d \rangle. \end{aligned}$$

Здесь $v(\vec{p})$ — фурье-образ потенциала (см. § 4); матричный элемент берется по дискретным индексам. Таким образом, общий вклад линии взаимодействия в выражении для матричного элемента дается выражением

$$(2\pi)^4 \delta^4(p_a + p_b - p_c - p_d) \langle \varrho_a \varrho_b | v(\vec{p}_c - \vec{p}_a) | \varrho_c \varrho_d \rangle,$$

где

$$\delta^4(p) = \delta(\vec{p}) \delta(\varepsilon).$$

В остальном сформулированные в предыдущем разделе правила остаются без изменений.

Выполнение законов сохранения энергии и импульса в каждом узле диаграммы позволяет перейти к более удобной форме изображения диаграммы, использующей эти законы в явном виде. С этой целью следует ввести идущий вдоль линии взаимодействия передаваемый импульс $\vec{k} = \vec{p}_c - \vec{p}_a$ (передаваемая энергия равна нулю, так как запаздывание не учитывается и v не зависит от энергии). При этом законы сохранения выполняются в каждом узле диаграммы (рис. 19).

Нередко, особенно при проведении общего анализа, нет необходимости отдельно рассматривать элементы S -матрицы, отвечающие соответственно поглощению частицы и испусканию дырки

(испусканию частицы и поглощению дырки). Выражение для элемента S -матрицы, объединяющего все возможности такого рода, получается по правилам Фейнмана с единственным отличием, касающимся пункта 3 этих правил: в выражение для элемента S -матрицы будет теперь входить N -произведение N ($\psi_a^+ \psi_a \psi_b^+ \psi_b \dots$), где ψ^+ , ψ — полные операторы поля. Аналогично в энергетическом представлении будет фигурировать величина N ($A_\mu^+ A_\nu \dots$) без ограничений на относительную величину ϵ_ν , $\epsilon_\mu \dots$ и ϵ_F . В соответствующих диаграммах, которые мы будем называть не-

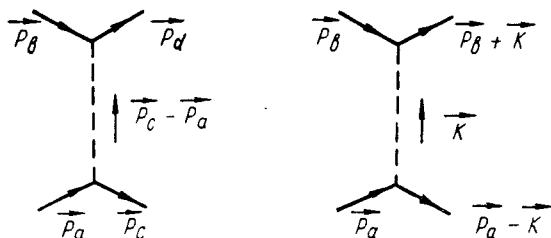


Рис. 19

ориентированными, достаточно указать лишь одну из возможных ориентаций каждого из свободных концов.

Некоторые примеры на использование правил Фейнмана будут приведены в следующем параграфе.

§ 14. ОБЩАЯ СТРУКТУРА МАТРИЦЫ РАССЕЯНИЯ

14. 1. Пользуясь правилами Фейнмана, можно перейти к анализу структуры S -матрицы в целом, не связывая себя низшими порядками теории возмущений*.

Разлагая S -матрицу сначала по T -произведениям, а затем по нормальным произведениям, увидим, что каждое нормальное произведение может появиться в любом порядке теории возмущений; в высших порядках оно будет сопровождаться соответственно большим числом сверток операторов. Иными словами, вклад в элемент S -матрицы, отвечающий данному процессу, дают члены всех порядков теории возмущений.

Суммируя коэффициенты при данном N -произведении во всех порядках теории возмущений, легко прийти к следующему общему представлению S -матрицы в виде суммы нормальных произведений:

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} S_{(n)}, \quad (14.1)$$

* Число частиц N в системе предполагается большим. Возможные нарушения приводимых соотношений касаются высших членов ряда теории возмущений и дают относительный вклад порядка $1/N$.

где

$$S_{(n)} = \int d1 \dots dn d1' \dots dn' K_n(1 \dots n, 1' \dots n') \times \\ \times N[\psi^+(1) \dots \psi^+(n) \psi(n') \dots \psi(1')].$$

Рассмотрим несколько первых членов этого разложения. Как будет видно из дальнейшего, соответствующие коэффициентные функции K играют важную роль в излагаемом аппарате.

14. 2. Начнем с нулевого члена выражения (14. 1):

$$S_{(0)} = K_0 = \langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle. \quad (14. 2)$$

Эта величина не является оператором и может быть получена усреднением выражения (14. 1) по состоянию Ψ_0 [см. соотношения (8. 6)]. Она описывает внутренние (вакуумные) переходы

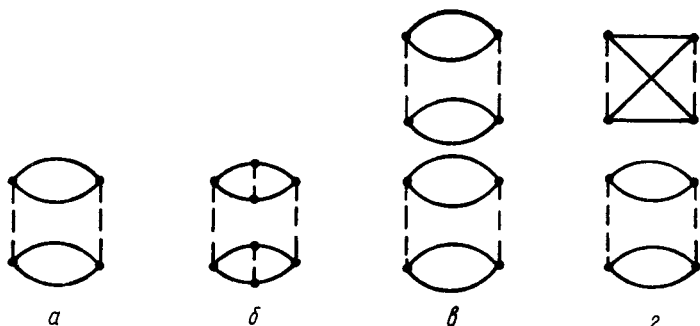


Рис. 20

системы без участия каких-либо внешних частиц или дырок. Примеры диаграмм таких переходов были приведены на рис. 15.

Указанные переходы не отвечают каким-либо реальным процессам, происходящим в системе, поэтому их можно вообще исключить из рассмотрения.

Разберем более подробно структуру величины K_0 . Предварительно введем понятие о связных диаграммах. Диаграмма называется связной, если ее нельзя расщепить линией, не пересекающей ни одной из линий диаграммы.

В величину K_0 вносят вклад как связные (рис. 20, а и б), так и несвязные (рис. 20, в и г) диаграммы. Обозначим через L сумму всех связных диаграмм, дающих вклад в K_0 . Тогда величину K_0 можно представить в виде

$$\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle = 1 + L + \frac{L^2}{2!} + \frac{L^3}{3!} + \dots = \exp(L). \quad (14. 3)$$

Здесь учтен вклад всех (связных и несвязных) диаграмм.

Первый член этого разложения связан с нулевым членом S -матрицы. Второй описывает все связные диаграммы. Третий включает в себя сумму вкладов (или просто сумму) всех несвязных

диаграмм, каждая из которых составлена из двух связных. Четвертый отвечает несвязным диаграммам, составленным из трех связных и т. д.

Поясним структуру этих членов, основываясь на правилах Фейнмана. Прежде всего, элемент S -матрицы несвязной диаграммы распадается на произведение независимых элементов, отвечающих связным диаграммам. В этом смысле появление степеней L^2 , L^3 и т. д. является совершенно естественным.

Что же касается численных коэффициентов, то появление факторов $1/2!$, $1/3!$ и т. д. объясняется следующим образом. Рассматривая для простоты третий член выражения (14. 3), представим L в виде суммы $\sum_n L_n$ диаграмм разного порядка теории воз-

мущений. Сконструируем теперь всевозможные несвязные диаграммы, составленные из пары связных. Необходимо различать два случая: пары одинаковых (см. рис. 20, *в*) и пары различных (см. рис. 20, *г*) связных диаграмм. В первом случае правило

Фейнмана 2 приведет к численному множителю $\frac{(-i)^{2n}(-i)^{2m}}{\varkappa_{\text{сум}}}$,

где n и m — порядок и число петель в каждой из связных диаграмм. Число $\varkappa_{\text{сум}}$, представляющее собой число обозначений аргументов, не меняющих выражения для элементов S -матрицы, равно $2\kappa^2$, где κ — аналогичное число для каждой из связных диаграмм. Лишняя двойка отражает тот факт, что для рассматриваемой несвязной диаграммы в число переобозначений входит взаимный обмен координат обеих (одинаковых) связных частей. Таким образом, та часть третьего члена выражения (14. 3), которая связана с парами одинаковых диаграмм, имеет вид $\frac{1}{2} \sum_n L_n^2$.

Что же касается пар неодинаковых диаграмм, то там фактор 2 отсутствует, так как указанная перестановка аргументов невозможна. Соответствующий вклад в третий член выражения (14. 3) равен просто $\sum_{n \neq m} L_n L_m$. Суммируя оба приведенных выражения,

приходим к нужному виду рассматриваемого члена. Аналогично обосновывается вид остальных членов выражения (14. 3).

Как уже указывалось в § 12, при стремлении параметра δ , определяющего скорость включения взаимодействия, к нулю величина L возрастает как $1/\delta$. Поэтому можно написать

$$\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle = \exp(L_0/\delta),$$

где $L = L_0/\delta$.

Вакуумные переходы всегда сопровождают реальный процесс; иными словами, рассматривая элемент S -матрицы, следует учитывать и несвязные диаграммы, содержащие вакуумные переходы. Рассуждения, аналогичные приведенным выше, показывают, что в рассматриваемом случае вакуумные переходы выделяются в виде множителя

$$S = \langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle S_{\text{реальн}}, \quad (14. 4)$$

где $S_{\text{реален}}$ — элемент S -матрицы самого интересующего нас процесса.

Таким образом, обнаруживается полная независимость вакуумных и реальных процессов (произведение вероятностей), что позволяет совершенно отвлечься от вакуумных переходов.

14. 3. Рассмотрим следующий член разложения (14. 1):

$$S_{(i)} = \int d1 d2 K_1(1, 2) N[\psi^+(1) \psi(2)]. \quad (14. 5)$$

Выделяя из K_1 член, отвечающий вакуумным переходам, получим

$$K_1(1, 2) = i \langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle \Sigma(1, 2),$$

где Σ носит название собственно энергетической части. Это название заимствовано из квантовой теории поля, где аналогичная величина описывает взаимодействие частицы с ее собственным полем.

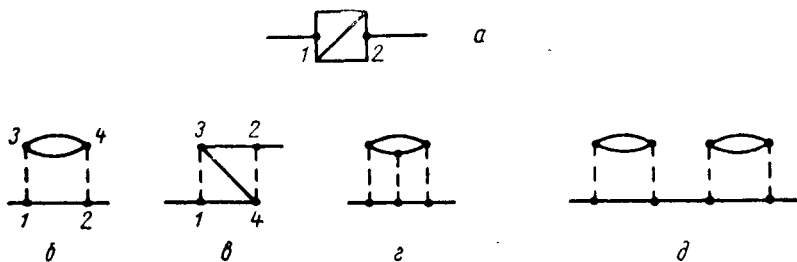


Рис. 21

В теории многих частиц $S_{(i)}$ описывает процессы перехода частицы из точки 1 в точку 2 или дырки в обратном направлении, т. е. процессы их распространения с учетом взаимодействия с частицами системы. Примеры таких переходов даны на рис. 14.

Собственно энергетической части также ставится в соответствие некоторый графический образ (рис. 21, а). На диаграммном языке Σ представляет собой сумму диаграмм, имеющих два свободных конца. Соответствующие примеры приведены на рис. 21, б—д.

Как будет выяснено в следующем параграфе, через величину Σ непосредственно выражаются важнейшие физические характеристики системы частиц.

Вычислим с помощью правил Фейнмана величину $\Sigma(1, 2)$ в низшем (втором) порядке теории возмущений (см. рис. 21, б и в). Отбрасывая равный единице в этом приближении фактор $\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle$, построим соответствующий элемент S -матрицы, имеющий вид

$$S = i \int d1 d2 \Sigma(1, 2) N[\psi^+(1) \psi(2)]. \quad (14. 6)$$

Производимые ниже операции будем нумеровать теми же цифрами, что и соответствующие правила Фейнмана в разделе 13. 2.

1. Единственные две топологически различные диаграммы процесса изображены на рис. 21, б и в.

2. Подсчет фактора $\kappa = 1$ для обеих диаграмм. Для первой диаграммы $m = 1$, для второй $m = 0$. Отсюда численный множитель при элементе S -матрицы равен соответственно $+1$ и -1 ($n = 2$).

3. Рассматривая одновременно все возможные процессы пространства, отвечающие нашим диаграммам, следует взять N -произведение в виде $N[\psi^+(1)\psi(2)]$.

4. Для первой диаграммы виртуальные линии описываются комбинацией

$$iG_0(2, 1) iG_0(3, 4) iG_0(4, 3),$$

для второй—

$$iG_0(4, 1) iG_0(3, 4) iG_0(2, 3).$$

5. В обоих случаях линиям взаимодействия отвечают множители

$$V(1, 3) V(2, 4).$$

6. В обоих случаях входят интегралы

$$\int d1 d2 d3 d4.$$

Используя выражение (14. 6), получим

$$\Sigma(1, 2) = -\int d3 d4 V(1, 3) V(2, 4) \{G_0(2, 1) G_0(3, 4) G_0(4, 3) - G_0(4, 1) G_0(3, 4) G_0(2, 3)\}. \quad (14. 7)$$

То же получится из сопоставления выражений (12. 5) и (12. 2) с (14. 5).

14. 4. Построим собственно энергетическую часть в энергетическом представлении, рассматривая переход $\mu \rightarrow \nu$ и перепишывая соотношение (14. 6) в виде

$$S_{\mu\nu} = 2\pi i \int d\varepsilon \sum_{\mu\nu}(\varepsilon) N(A_\nu^\dagger A_\mu) \delta(\varepsilon - \varepsilon_\mu) \delta(\varepsilon - \varepsilon_\nu).$$

Определенная таким образом величина $\sum_{\mu\nu}(\varepsilon)$ удовлетворяет соотношению

$$\Sigma(1, 2) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \exp[-i\varepsilon(t_1 - t_2)] \sum_{\mu, \nu} \chi_\mu^*(q_2) \chi_\nu(q_1) \sum_{\mu\nu}(\varepsilon), \quad (14. 8)$$

т. е. является коэффициентом разложения по системе χ_ν и фурье-образом по $t_1 - t_2$ функции $\Sigma(1, 2)$.

Используем далее правила Фейнмана, изложенные в разделе 13. 3.

1. Топологически различные энергетические диаграммы изображены на рис. 18, а и б.

2. То же, что в разделе 14. 3.

3. Появляется $N(A_\nu^\dagger A_\mu)$.

4. Появляется комбинация

$$\left(\frac{i}{2\pi}\right)^3 \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 G_{0\mu_1}(\varepsilon_1) G_{0\mu_2}(\varepsilon_2) G_{0\mu_3}(\varepsilon_3).$$

5. Матричные элементы, входящие в первую диаграмму, имеют вид

$$\langle \mu, \mu_3 | V | \mu_1, \mu_2 \rangle \langle \mu_1, \mu_2 | V | \nu, \mu_3 \rangle,$$

во вторую —

$$\begin{aligned} & \langle \mu, \mu_3 | V | \mu_1, \mu_2 \rangle \langle \mu_1, \mu_2 | V | \mu_3, \nu \rangle = \\ & = \langle \mu, \mu_3 | V | \mu_1, \mu_2 \rangle \langle \mu_1, \mu_2 | V \mathcal{F} | \nu, \mu_3 \rangle, \end{aligned}$$

где \mathcal{F} — оператор обмена координат (или, что то же, обмена индексов состояния)*.

Кроме того, входят δ -функции

$$(2\pi)^2 \delta(\varepsilon_\mu + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2) \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_\nu).$$

Окончательно получаем

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mu\nu}(\varepsilon) = & -\frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 \langle \mu \mu_3 | V | \mu_1 \mu_2 \rangle \\ & \langle \mu_1 \mu_2 | V(1 - \mathcal{F}) | \nu \mu_3 \rangle G_{0\mu_1}(\varepsilon_1) G_{0\mu_2}(\varepsilon_2) G_{0\mu_3}(\varepsilon_3) \times \\ & \times \delta(\varepsilon + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2). \end{aligned}$$

Интегрирование по энергиям можно произвести в конечном виде, используя результаты приложения В. Это дает

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mu\nu}(\varepsilon) = & \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \langle \mu \mu_3 | V | \mu_1 \mu_2 \rangle \langle \mu_1 \mu_2 | V(1 - \mathcal{F}) | \nu \mu_3 \rangle \times \\ & \times \left\{ \frac{(1 - n_{\mu_1})(1 - n_{\mu_2})n_{\mu_3}}{\varepsilon + \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_1} - \varepsilon_{\mu_2} + i\delta} + \frac{n_{\mu_1}n_{\mu_2}(1 - n_{\mu_3})}{\varepsilon + \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_1} - \varepsilon_{\mu_2} - i\delta} \right\}. \quad (14.9) \end{aligned}$$

Первый член в фигурных скобках отвечает собственно диаграммам, изображенным на рис. 18, а и б: состояния μ_1 и μ_2 присущи частицам и вносят вклад в соотношение (14.9) лишь выше сферы Ферми, состояние μ_3 — дырочное и эффективно лишь ниже сферы Ферми. Второй член в фигурных скобках отвечает диаграммам, топологически эквивалентным рассмотренным выше (см. рис. 18, в). Здесь состояния μ_1, μ_2 отвечают дыркам, μ_3 — частице. Это как бы вывернутая наизнанку диаграмма рис. 18, а.

Рассмотрим собственно энергетическую часть в импульсном представлении для пространственно-однородной системы. Исходя из разложения Фурье

$$\Sigma(x) = \int d^4p \Sigma(\vec{p}, \varepsilon) \exp[i(\vec{p}x - \varepsilon t)]$$

* Диаграммы, которым отвечает оператор обмена \mathcal{F} , будем называть обменными корреляционными диаграммами.

и используя правила Фейнмана для диаграмм рис. 22, найдем (q — дискретные индексы):

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}(\vec{p}, \varepsilon) = & \int d^3q d^3k \sum_{\mathbf{q}_3} \left\{ \langle \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_3 | |v(\vec{k})|^2 | \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_3 \rangle - \right. \\ & \left. - \langle \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_3 | v^*(\vec{k}) v(\vec{p} - \vec{q} - \vec{k}) | \mathbf{q}_3 \mathbf{q}_2 \rangle \right\} \times \\ & \times \left\{ \frac{(1 - n_{\vec{p}-\vec{k}})(1 - n_{\vec{q}+\vec{k}})n_q}{\varepsilon + \varepsilon_q - \varepsilon_{\vec{p}-\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{q}+\vec{k}} + i\delta} + \frac{n_{\vec{p}-\vec{k}}n_{\vec{q}+\vec{k}}(1 - n_q)}{\varepsilon + \varepsilon_q - \varepsilon_{\vec{p}-\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{q}+\vec{k}} - i\delta} \right\}, \end{aligned} \quad (14.10)$$

где

$$n_p = \theta(p_0^2 - p^2).$$

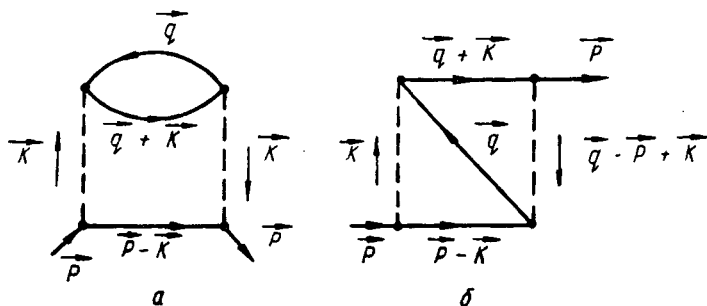


Рис. 22

Для потенциала, являющегося просто функцией координат, выражение в квадратных скобках приобретает вид

$$\delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \left\{ g |v(\vec{k})|^2 - v^*(\vec{k}) v(\vec{p} - \vec{q} - \vec{k}) \right\},$$

где g — фактор вырождения (см. § 4).

14. 5. Третий член разложения (14. 1) имеет вид

$$S_{(2)} = \int d1 d2 d3 d4 K_2(1, 2, 3, 4) N [\psi^+(1) \psi^+(2) \psi(4) \psi(3)]. \quad (14.11)$$

Выделяя процессы вакуумного типа, имеем

$$K_2 = \langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle \Gamma(1, 2, 3, 4),$$

где Γ — потенциал эффективного взаимодействия или вершинной части.

Элемент $S_{(2)}$ описывает всевозможные процессы, диаграммы которых содержат четыре свободных конца. Сюда относятся процессы рассеяния частицы на частице, дырки на дырке, частицы на дырке с учетом их корреляционного взаимодействия с системой частиц. Примеры таких диаграмм, рассматривавшихся и выше,

приведены на рис. 23, где видно, что действительно вершинная часть, которую графически представляют символом, изображенным на рис. 23, *a*, в определенном смысле описывает модифицированный закон взаимодействия, показывая, как меняется линия взаимодействия при учете корреляционного взаимодействия.

В низшем порядке теории возмущения, как видно из сравнения выражений (14. 11) и (12. 1) *,

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) = -\frac{i}{2} V(1, 2) \delta(1-3) \delta(2-4). \quad (14. 12)$$

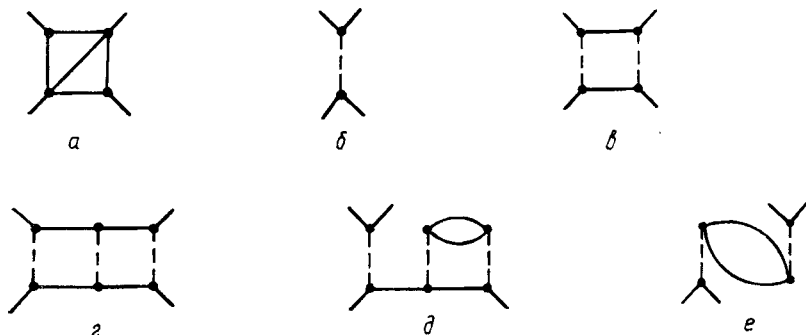


Рис. 23

Собственно энергетическая и вершинная части, описывая влияние корреляционных эффектов на линию частицы и линию взаимодействия, являются важнейшими структурными элементами, из которых можно построить диаграмму любого процесса (подробнее см. § 20, 25).

§ 15. МАТРИЦА РАССЕЯНИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ ВЕЛИЧИНЫ

15. 1. Располагая выражением для собственно энергетической части *S*-матрицы, можно получить разностороннюю физическую информацию о рассматриваемой системе многих частиц.

Найдем прежде всего выражение для одночастичной матрицы плотности системы с учетом корреляционного взаимодействия между частицами. С помощью этой величины можно получать сведения о тех же характеристиках системы, что и с помощью матрицы плотности в приближении Хартри — Фока, которую мы здесь обозначим через R_0 :

$$R_0(q_1, q_2) = \langle \Psi_0 | \psi^+(q_2) \psi(q_1) | \Psi_0 \rangle.$$

* Учитывая антисимметрию Γ относительно перестановок $1 \leftrightarrow 2$ или $3 \leftrightarrow 4$, в соотношении (14. 12) следовало бы сделать замену:

$$\delta(1-3) \delta(2-4) = \frac{1}{2} [\delta(1-3) \delta(2-4) - \delta(1-4) \delta(2-3)].$$

Включение корреляционного взаимодействия отразится, очевидно, только на волновых функциях Ψ_0 , которые следует заменить точными волновыми функциями Ψ_r^* . Что же касается операторов поля, то в представлении Шредингера их вид вообще не меняется от взаимодействия. Таким образом, точная матрица плотности имеет вид

$$R(q_1, q_2) = \langle \Psi | \Psi^+(q_2) \Psi(q_1) | \Psi \rangle. \quad (15. 1)$$

Чрезвычайно удобно сделать замену

$$\Psi^+(q_2) \Psi(q_1) = \lim_{\substack{t_2 > t_1 \\ t_1, t_2 \rightarrow 0}} T[\Psi_r^+(2) \Psi_r(1)]. \quad (15. 2)$$

Здесь величина t_2 , как и t_1 , стремится к нулю, но остается больше t_1 . При этом, во-первых, соблюдается требуемый порядок операторов и, во-вторых, каждый из них совпадает с оператором в представлении Шредингера. В результате получаем

$$R(q_1, q_2) = \lim_{t_2 - t_1 \rightarrow +0} \langle \Psi | T[\Psi_r^+(2) \Psi_r(1)] | \Psi \rangle. \quad (15. 3)$$

Рассматриваемое среднее значение зависит фактически только от разности времен $t_1 - t_2$.

Перейдем в этом выражении от представления Гейзенберга к представлению взаимодействия, пользуясь соотношениями (9. 21) и (9. 26):

$$\begin{aligned} \Psi_r(1) &= S(0, t_1) \Psi_B(1) S(t_1, 0), \\ \Psi_r^+(1) &= S(0, t_1) \Psi_B^+(1) S(t_1, 0), \\ \Psi &= S(0, -\infty) \Psi_0, \\ \Psi^* &= \Psi_0^* S(-\infty, 0). \end{aligned}$$

Среднее значение, входящее в выражение (15. 3), принимает при $t_2 > t_1$ следующий вид:

$$\langle \Psi_0 | S(-\infty, t_2) \Psi_B^+(2) S(t_2, t_1) \Psi_B(1) S(t_1, -\infty) | \Psi_0 \rangle.$$

Здесь использовано групповое свойство S -матрицы (9. 7). Записывая $S(-\infty, t_2)$ через $S^{-1}(\infty, -\infty) S(\infty, t_2)$, учтем свойство устойчивости основного состояния (9. 18'). Рассматриваемое среднее значение можно, таким образом, переписать в виде

$$\frac{\langle \Psi_0 | S(\infty, t_2) \Psi_B^+(2) S(t_2, t_1) \Psi_B(1) S(t_1, -\infty) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}.$$

Из этого выражения видно, что операторы, входящие под знак среднего, расположены точно в хронологическом порядке **: сна-

* В дальнейшем для упрощения формул будем опускать индекс «г» у Ψ_r .

** Представление S -матрицы в виде хронологического произведения допускает следующую наглядную интерпретацию. Разобьем $S(\infty, -\infty)$ на произвольное число сомножителей, пользуясь свойством S -матрицы (9. 7): $S(\infty, -\infty) = S(\infty, t_1) S(t_1, t_2) \dots S(t_n, -\infty)$. Здесь $t_1 > t_2 > \dots > t_n$. Хронологизация предстает тут в явном виде: каждый из сомножителей содержит времена более поздние, чем у правого, и более ранние, чем у левого соседа.

чала идет часть S -матрицы, содержащая времена, большие t_2 ; затем оператор в момент t_2 ; далее часть S -матрицы, отвечающая временам, большим t_1 , но меньшим t_2 , и т. д. Объединяя рассматриваемое выражение с аналогичным выражением, относящимся к случаю $t_1 > t_2$, можно написать окончательно

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | T [\Psi_r^+(2) \Psi_r(1)] | \Psi \rangle = \\ & = \frac{\langle \Psi_0 | T [\Psi_b^+(2) \Psi_b(1) S] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}. \end{aligned} \quad (15.4)$$

Это важнейшее соотношение, которое будет широко использоваться в дальнейшем.

Выражение (15.3) легко непосредственно выразить через собственную энергетическую часть S -матрицы. Подставляя в числитель соотношения (15.4) разложение S -матрицы (14.1), увидим, что можно ограничиться рассмотрением лишь первых двух членов этого разложения

$$S = \langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle \{ 1 + i \int d1 d2 \Sigma(1, 2) N [\Psi_b^+(1) \Psi_b(2)] + \dots \}.$$

В самом деле, применяя теоремы Вика, нетрудно убедиться, что члены более высокого порядка приведут к появлению под знаком среднего нормальных произведений, отличных от $N(1)$. Последующее усреднение даст, очевидно, нулевой результат.

Первый член разложения S приводит просто к величине

$$\langle \Psi_0 | T [\Psi_b^+(2) \Psi_b(1)] | \Psi_0 \rangle.$$

Что же касается второго, то дело сводится к вычислению среднего

$$\langle \Psi_0 | T \{ \Psi_b^+(2) \Psi_b(1) N [\Psi_b^+(3) \Psi_b(4)] \} | \Psi_0 \rangle.$$

Применяя теорему Вика для смешанных T -произведений, легко видеть, что единственным отличным от нуля будет член

$$iG_0(1, 3) (-i) G_0(4, 2),$$

где G_0 — свободная функция Грина (см. § 10).

Таким образом,

$$\begin{aligned} \langle \Psi | T [\Psi_r^+(2) \Psi_r(1)] | \Psi \rangle & = \langle \Psi_0 | T [\Psi_b^+(2) \Psi_b(1)] | \Psi_0 \rangle + \\ & + i \int d3 d4 G_0(1, 3) \Sigma(3, 4) G_0(4, 2). \end{aligned} \quad (15.5)$$

Возвращаясь к матрице плотности (15.1), имеем

$$\begin{aligned} R(q_1, q_2) & = R_0(q_1, q_2) + \\ & + \lim_{t_2 \rightarrow t_1 + 0} i \int d3 d4 G_0(1, 3) \Sigma(3, 4) G_0(4, 2). \end{aligned} \quad (15.6)$$

Первое слагаемое этого выражения отвечает приближению Хартри — Фока, второе описывает корреляционные поправки к матрице плотности.

15. 2. Из соотношения (15. 6) нетрудно найти выражение для плотности числа частиц системы

$$\varrho(\vec{x}_1) = \text{Sp}_{\sigma\tau} R(\vec{x}_1, \sigma_1, \tau_1; \vec{x}_1, \sigma_2, \tau_2), \quad (15. 7)$$

откуда

$$\varrho(\vec{x}_1) - \varrho_0(\vec{x}_1) = \text{Sp}_{\sigma\tau} i \int_{\substack{t_2 \rightarrow 1 \\ t_2 > t_1}} d^3 d^4 G_0(1, 3) \Sigma(3, 4) G_0(4, 2)$$

(ϱ_0 — плотность в приближении Хартри — Фока). Это соотношение описывает перераспределение частиц в пространстве под действием корреляционного взаимодействия. В случае пространственно-однородной системы такого перераспределения вообще нет.

Для пространственно-однородных систем представляет интерес вопрос о перераспределении частиц по импульсам. Переходя от выражения (15. 6) к функции распределения по импульсам, найдем, вычисляя фурье-образ по $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$:

$$\varrho(\vec{p}) - \varrho_0(\vec{p}) = \lim_{t_2 - t_1 \rightarrow +0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \exp[i\varepsilon(t_2 - t_1)] \times \\ \times \frac{g\Sigma(\vec{p}, \varepsilon)}{[\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}} + i\delta \text{sign}(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F)]^2}.$$

Это выражение целесообразно привести к иному виду. Продолжим подынтегральное выражение в последнем интеграле в комплексную плоскость ε . Учитывая, что это выражение достаточно быстро затухает с ростом ε и что в верхней полуплоскости ε показатель экспоненты $i\varepsilon(t_2 - t_1)$ имеет отрицательную действительную часть, т. е. экспонента также затухает с ростом $\text{Im}\varepsilon$, можно, согласно теореме Коши, заменить интегрирование по ε по действительной оси интегрированием по замкнутому контуру C , включающему половину большого круга в верхней полуплоскости (рис. 24). Интеграл по этому полукругу вносит пренебрежимый вклад.

Теперь уже можно перейти к пределу $t_2 - t_1 \rightarrow 0$; приведенный ниже интеграл сводится к сумме вычетов в полюсах функций Σ и $(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}}) + i\delta \text{sign}(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F)$, лежащих в верхней полуплоскости:

$$\varrho(\vec{p}) - \varrho_0(\vec{p}) = i \int_C \frac{d\varepsilon}{2\pi} \cdot \frac{g\Sigma(\vec{p}, \varepsilon)}{[(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}}) + i\delta \text{sign}(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F)]^2}. \quad (15. 8)$$

15. 3. Переходим к выражению через Σ важнейшей характеристики основного состояния системы — его энергии E . За основу примем обычное выражение для E

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (15. 9)$$

где гамильтониан в представлении Шредингера запишем в первоначальном виде (3. 29):

$$H = \int dq \psi^+(q) T \psi(q) + \frac{1}{2} \int dq dq' \psi^+(q) \psi^+(q') V \psi(q') \psi(q).$$

Выразим это соотношение через гейзенберговские операторы ψ_r в момент $t = 0$. Учитывая уравнение движения для этих операторов (см. раздел 3. 9), можно написать

$$\begin{aligned} H &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2} \int dq_1 \psi_r^+(1) \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + T \right) \psi_r(1) = \\ &= \frac{1}{2} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_1 \rightarrow 0}} \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + T \right) \psi_r^+(2) \psi_r(1). \end{aligned}$$

Вводя $t_2 > t_1$ и подставляя в выражение (15. 9), можно написать

$$E = \frac{1}{2} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + T \right) \langle \Psi | T [\psi_r^+(2) \psi_r(1)] | \Psi \rangle.$$

Далее можно использовать соотношение (15. 5). Первый член его правой части отвечает приближению Хартри — Фока и при подстановке в E дает

$$E_0 = \text{Sp} [(T + W/2) \varrho].$$

Остающаяся часть энергии отвечает корреляционному взаимодействию и имеет вид

$$\begin{aligned} E - E_0 &= \frac{i}{2} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + T \right) \int d3 d4 G_0(1, 3) \times \\ &\times \Sigma(3, 4) G_0(4, 2). \end{aligned} \quad (15. 10)$$

Чтобы выяснить физический смысл этого выражения, представим его в несколько ином виде. Учитывая уравнение

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) G_0(1, 2) = \delta(1 - 2),$$

имеем

$$\begin{aligned} E - E_0 &= \int dq_1 \lim_{q_2 \rightarrow q_1} \left(T + \frac{W}{2} \right) [R(q_1, q_2) - R_0(q_1, q_2)] + \\ &+ \frac{i}{2} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} d3 \Sigma(1, 3) G_0(3, 2). \end{aligned} \quad (15. 11)$$

Здесь использовано соотношение (15. 6). Первый член выражения (15. 11) описывает изменение кинетической энергии частиц

и их самосогласованного взаимодействия за счет обусловленного корреляционными эффектами их перераспределения по состояниям. Что же касается второго члена, то он отвечает изменению самого характера взаимодействия между частицами, т. е. учитывает собственно корреляционные эффекты.

15. 4. Выражение для энергии системы можно представить в иной форме, если воспользоваться приемом, уже применявшимся в § 9. Заменим гамильтониан корреляционного взаимодействия H' величиной $\lambda H'$, где λ — некоторый параметр, который после проведения выкладок будет положен равным единице. При этом все величины, фигурирующие в расчете: Ψ_r , Ψ_r^+ , S , Σ и т. п., будут функциями λ .

Используем общую квантовомеханическую теорему [24]

$$\partial E / \partial \lambda = \langle \Psi | \partial H / \partial \lambda | \Psi \rangle, \quad (15. 12)$$

для доказательства которой достаточно продифференцировать по λ уравнение $(H - E) \Psi = 0$, умножить результат слева на Ψ^* и учесть эрмитов характер H . В рассматриваемом случае $\partial H / \partial \lambda = H'$ и мы приходим к выражению

$$E - E_0 = \int_0^1 d\lambda \langle \Psi | H' | \Psi \rangle. \quad (15. 13)$$

Здесь учтено, что при $\lambda = 0$ мы возвращаемся к приближению Хартри — Фока.

Оператор H' выражается в форме

$$H' = \frac{1}{\lambda} (H - H_0),$$

где оператору H может быть придан вид

$$H = \int dq_1 \Psi^+(q_1) [T + (1 - \lambda) W] \Psi(q_1) + \\ + \frac{\lambda}{2} \int dq_1 dq_2 \Psi^+(q_1) \Psi^+(q_2) V \Psi(q_2) \Psi(q_1) + (1 - \lambda) C.$$

Здесь $C = -\frac{1}{2} \int dq \langle \Psi_0 | \Psi^+(q) W \Psi(q) | \Psi_0 \rangle$. Справедливость выражения для H легко проверить, собирая члены, пропорциональные λ , которые в точности дают N -произведение требуемого вида. Повторяя рассуждения предыдущего раздела, находим

$$H = \frac{1}{2} \int_{t_1 \rightarrow 0} dq_1 \Psi_r^+(1) \left[i \frac{\partial}{\partial t_1} + T + (1 - \lambda) W \right] \Psi_r(1) + (1 - \lambda) C.$$

Вычитая отсюда

$$H_0 = \int_{t_1 \rightarrow 0} dq_1 \Psi_r^+(1) (T + W) \Psi_r(1) + C,$$

получим

$$H' = \frac{1}{2\lambda} \int dq_1 \Psi_r^+(1) \left[i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - (1 + \lambda) W \right] \Psi_r(1) - C.$$

Окончательно с учетом уравнения $(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W) \Psi_B(1) = 0$ можно написать

$$\langle \Psi | H' | \Psi \rangle = \frac{1}{2\lambda} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} \left[i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - (1 + \lambda)W \right] \times \\ \times \{ \langle \Psi | T [\Psi_r^+(2) \Psi_r(1)] | \Psi \rangle - \langle \Psi_0 | T [\Psi_B^+(2) \Psi_B(1)] | \Psi_0 \rangle \}.$$

Наконец, подставляя это выражение в (15. 13) и используя соотношения (15. 5) и (10. 6), находим

$$E - E_0 = \frac{i}{2} \int \frac{d\lambda}{\lambda} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} \int d^3 \left\{ \Sigma(1, 3) G_0(3, 2) - \right. \\ \left. - \lambda W \int d^4 G_0(1, 3) \Sigma(3, 4) G_0(4, 2) \right\}. \quad (15. 14)$$

В случае пространственно-однородной системы

$$E - E_0 = \frac{\Omega}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4 p \times \\ \times \left\{ \Sigma(p) G_0(p) - \lambda \left(\varepsilon_p - p^2/2M \right) G_0^2(p) \Sigma(p) \right\}. \quad (15. 14')$$

Здесь от λ зависит величина Σ , будучи собственно энергетической частью S -матрицы, отвечающей гамильтониану $\lambda H'$.

Разложение полученного выражения в ряд теории возмущений по H' проще всего проводить, разлагая подынтегральное выражение в ряд по λ . В частности, в низшем (втором) порядке теории возмущений имеем

$$E - E_0 = \frac{i}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} \Sigma_0(1, 3) G_0(3, 2). \quad (15. 15)$$

Здесь Σ_0 — собственно энергетическая часть низшего порядка (см. § 14); эта величина пропорциональна λ^2 .

Переходя в энергетическое представление и вводя величину $\Sigma_{\nu\mu}(\varepsilon)$, получаем

$$E - E_0 = \frac{i}{4} \int_c \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sum_{\nu} \frac{\Sigma_{0\nu\nu}(\varepsilon)}{[\varepsilon - \varepsilon_{\nu} + i\delta \text{sign}(\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_F)]^2}.$$

Подстановка выражения (14. 8) и проведение несложного интегрирования по ε (см. приложение В) дают *

$$E - E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} n_{\mu_1} n_{\mu_2} (1 - n_{\mu_3}) (1 - n_{\mu_4}) \times \\ \times \frac{|\langle \mu_1 \mu_2 | V(1 - \mathcal{P}) | \mu_3 \mu_4 \rangle|^2}{\varepsilon_{\mu_1} + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_4}}. \quad (15. 16)$$

* Нетрудно проверить равенство

$$|\langle \mu_1 \mu_2 | V(1 - \mathcal{P}) | \mu_3 \mu_4 \rangle|^2 = 2 \langle \mu_1 \mu_2 | V | \mu_3 \mu_4 \rangle \langle \mu_3 \mu_4 | V(1 - \mathcal{P}) | \mu_1 \mu_2 \rangle.$$

Это выражение очень напоминает низший член разложения в обычный ряд шредингеровской теории возмущений, отвечающий гамильтониану возмущения H_1 (см. § 1). Отличие состоит в том, что в выражении (15. 16) оба промежуточных состояния μ_3 и μ_4 должны порознь отличаться от начальных состояний; в то же время в обычной теории возмущений невозможно лишь одновременное совпадение состояний μ_3, μ_4 с μ_1, μ_2 (подробнее см. § 17).

15. 5. Рассмотрим корреляционную энергию системы, распределение плотности в которой близко к однородному. Точнее говоря, предполагается, что движение частиц в самосогласованном поле является квазиклассическим, при этом

$$\xi = d\lambda/dx \sim d/x_0 \ll 1. \quad (15. 17)$$

Здесь x_0 — характерная длина неоднородности, т. е. расстояние, на котором заметно меняются характеристики самосогласованного поля; $d \sim 1/\rho_0$ — среднее расстояние между частицами.

В приближении Хартри — Фока величина d является единственным характерным параметром размерности длины. Фактически самосогласованное поле входит лишь в величину $\rho_0^2(x) \sim d(x)^{-2}$, где $d(x)$ — среднее расстояние между частицами в окрестности данной точки. Поэтому выполнение условия (15. 17) в этом случае дает возможность считать систему в каждом элементе объема однородной и использовать для вычисления локальных характеристик системы формулы, справедливые для однородного случая, но отнесенные к соответствующему значению плотности. При переходе к другому элементу объема значение плотности меняется, но формулы по-прежнему сохраняют свою силу. Система при этом имеет, как говорят, «квазиоднородный» характер; величины, описывающие локальные ее свойства, зависят от координаты x , как от параметра. Интегральные величины, имеющие для однородной системы вид $\Omega f(\rho)$ заменяются при этом на $\int d\vec{x} f[\rho(x)]$. Точность такой замены определяется величиной квантовых эффектов, малых при выполнении условия (15. 17).

При выходе за рамки приближения Хартри — Фока оказывается недостаточным выполнить условие (15. 17), чтобы систему можно было бы рассматривать как квазиоднородную. Дело в том, что величины, описывающие корреляционные эффекты, обязательно содержат помимо d еще одну характерную величину размерности длины — радиус действия сил R .

Поэтому система может считаться квазиоднородной только в том случае, если наряду с условием (15. 17) выполнено также условие

$$R/x_0 \ll 1. \quad (15. 18)$$

В разреженной системе, где $R \ll d$, условие (15. 18) оказывается излишним. Однако в сжатой системе, где $R \gg d$, определяющим является условие (15. 18), невыполнение которого влечет за собой

появление в соответствующих выражениях сложной нелокальной зависимости от координат.

Характерным примером является тяжелый несжатый атом, для которого условие (15. 17) выполнено ($\xi \sim Z^{-1/3}$). Однако условие (15. 18) оказывается нарушенным, поскольку $R \sim (a_0/p_0)^{1/2} \sim a_0 Z^{-1/3}$ и $x_0 \sim a_0 Z^{-1/3}$.

Это существенно осложняет исследование корреляционных эффектов в неоднородных системах.

15. 6. Естественный путь построения элементов S -матрицы слабонеоднородной системы, для которой выполнены оба условия (15. 17), (15. 18), состоит в написании соответствующих величин в координатном представлении и использовании приближенных выражений для функции Грина (10. 11).

Однако теперь нас интересует корреляционная поправка к энергии низшего порядка, поэтому мы выберем более общий путь, который даст возможность проиллюстрировать утверждения предыдущего раздела. При этом будет использовано уже готовое выражение для $E - E_0$ в энергетическом представлении (15. 16), которое мы перепишем в виде

$$E - E_0 = \int dq_1 dq_2 dq_3 dq_4 V(q_1, q_2) V(q_3, q_4) \times \\ \times \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_4} \frac{n_{\mu_1} n_{\mu_2} (1 - n_{\mu_3}) (1 - n_{\mu_4})}{\varepsilon_{\mu_1} + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_4}} \chi_{\mu_3}^*(q_1) \chi_{\mu_4}^*(q_2) \chi_{\mu_2}(q_2) \times \\ \times \chi_{\mu_1}(q_1) \chi_{\mu_3}(q_3) \chi_{\mu_4}(q_4) (1 - \mathcal{P}_{q_3 q_4}) \chi_{\mu_1}^*(q_3) \chi_{\mu_2}^*(q_4).$$

Здесь мы явно раскрыли выражения для матричных элементов и считаем для простоты потенциал V функцией только $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$.

Удобно представить энергетический знаменатель в виде (см. приложение В) *

$$P(\varepsilon_{\mu_1} + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_4})^{-1} = \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{sign}(t) \exp[it(\varepsilon_{\mu_1} + \\ + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_4})].$$

При этом нам придется иметь дело с величинами типа

$$\sigma(q_1, q_2, t) = \sum_{\mu} \chi_{\mu}^*(q_2) \chi_{\mu}(q_1) n_{\mu} \exp(it\varepsilon_{\mu}),$$

$$\sigma'(q_1, q_2, t) = \sum_{\mu} \chi_{\mu}^*(q_2) \chi_{\mu}(q_1) (1 - n_{\mu}) \exp(-it\varepsilon_{\mu}),$$

через которые искомая величина выражается следующим образом:

$$E - E_0 = \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{sign}(t) \int dq_1 dq_2 dq_3 dq_4 V(q_1, q_2) V(q_3, q_4) \times \\ \times \sigma'(q_3, q_1, t) \sigma'(q_4, q_2, t) (1 - \mathcal{P}_{q_3 q_4}) \sigma(q_1, q_3, t) \sigma(q_2, q_4, t). \quad (15. 19)$$

* Ввиду наличия в выражении для $E - E_0$ факторов n_{μ_1} , $(1 - n_{\mu_2})$ и т. д. соответствующий знаменатель не обращается в нуль и потому его можно рассматривать в смысле главного значения.

Используем далее прием, состоящий в переходе к явной операторной формулировке задачи [81]. С этой целью заменим величины ε_μ , n_μ соответственно на

$$T + W, \quad \theta [\varepsilon_F - (T + W)].$$

Величины σ и σ' можно тогда представить в следующем операторном виде:

$$\begin{aligned} \sigma(q_1, q_2, t) &= \theta [\varepsilon_F - (T + W)_{q_1}] \exp [it (T + W)_{q_1}] \delta(q_1 - q_2), \\ \sigma'(q_1, q_2, t) &= \theta [(T + W)_{q_1} - \varepsilon_F] \exp [-it (T + W)_{q_1}] \delta(q_1 - q_2). \end{aligned}$$

Пренебрегая некоммутацией операторов T и W и обменными эффектами, находим

$$\left. \begin{aligned} \sigma(q_1, q_2, t) &= \int d^3 p \theta [p_0^2(x_1) - p^2] \times \\ &\times \exp \left[it \left(\frac{p^2 - p_0^2(x_1)}{2M} - \varepsilon_F \right) + i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \right] \delta_{(q_1, q_2)}, \\ \sigma'(q_1, q_2, t) &= \int d^3 p \theta [p^2 - p_0^2(x_1)] \times \\ &\times \exp \left[-it \left(\frac{p^2 - p_0^2(x_1)}{2M} - \varepsilon_F \right) + i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \right] \delta_{(q_1, q_2)}. \end{aligned} \right\} \quad (15.20)$$

Такое представление отвечает, очевидно, выбору функций Грина в виде выражений (10.11), (10.12)

При подстановке полученных выражений в соотношение (15.19) появляется функция p_0^2 от двух разных аргументов \vec{x}_1 и \vec{x}_2 . Расстояние между точками x_1 и x_2 не превышает радиуса действия сил R , о чем свидетельствует наличие множителя $V(q_1, q_2)$ *. Поэтому выполнение условия (15.18) дает возможность пренебречь в p_0^2 различием в величине этих аргументов. Выполняя далее несложное, но громоздкое интегрирование, приходим к соотношению

$$\begin{aligned} E - E_0 &= -2M(2\pi)^3 \int d\vec{x} \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 k \theta [p_0^2(x) - p_1^2] \times \\ &\times \frac{\theta [p_0^2(x) - p_2^2] \theta [(\vec{p}_1 + \vec{k})^2 - p_0^2(x)] \theta [(\vec{p}_2 - \vec{k})^2 - p_0^2(x)]}{(\vec{p}_1 + \vec{k})^2 + (\vec{p}_2 - \vec{k})^2 - p_1^2 - p_2^2} \left[g^2 |v(\vec{k})|^2 - \right. \\ &\left. - gv^*(\vec{k}) v(\vec{p}_2 - \vec{p}_1 - \vec{k}) \right], \end{aligned} \quad (15.21)$$

где g — фактор вырождения; $v(\vec{k})$ — фурье-образ потенциала.

Полученное выражение действительно имеет квазиоднородный характер. Для перехода к чисто однородному случаю достаточно

* В случае кулоновской системы необходимо учитывать также диаграммы высшего порядка, что приведет к дебаевскому экранированию (см. § 16).

заменить $p_0^2(x)$ на p_0^2 и $\int d\vec{x}$ на Ω [при этом можно использовать выражение (15. 21) и в случае произвольного закона дисперсии $\varepsilon_{\vec{p}}$]:

$$E - E_0 = -2M\Omega (2\pi)^3 \int \frac{d^3p_1 d^3p_2 d^3k n_{p_1} n_{p_2} (1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}}) (1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}})}{(\vec{p}_1 + \vec{k})^2 + (\vec{p}_2 - \vec{k})^2 - p_1^2 - p_2^2} \times \\ \times \left[g^2 \left| \mathbf{v}(\vec{k}) \right|^2 - g \mathbf{v}^*(\vec{k}) \mathbf{v}(\vec{p}_2 - \vec{p}_1 - \vec{k}) \right]. \quad (15. 22)$$

15. 7. Невыполнение условия (15. 18) приводит к появлению в выражении (15. 21) двух граничных импульсов $p_0^2(x_1)$, $p_0^2(x_2)$, благодаря чему это выражение теряет свой локальный характер.

Однако более существенным является вопрос о справедливости самих квазиклассических выражений типа (10. 11), (15. 20) при невыполнении условия (15. 18). Дело сводится к выяснению роли квантовых эффектов в соответствующих выражениях.

Используем операторные выражения для функций σ и σ' , приведенные в предыдущем разделе. Разлагая δ -функции в интеграл Фурье, для характерной комбинации, входящей в соотношение (15. 19) *, можно написать следующее выражение:

$$\sigma(q_1, q_3, t) \sigma'(q_3, q_1, t) = \delta_{0,0_3} \int d^3p_1 d^3p_2 \exp \left[i (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \times \right. \\ \left. \times (\vec{x}_1 - \vec{x}_3) \right] \langle \theta(\varepsilon_F - T - W) \exp [it(T + W)] \rangle_{p_1} \times \\ \times \langle \theta(T + W - \varepsilon_F) \exp [-it(T + W)] \rangle_{p_2} \quad (15. 23)$$

(обозначение $\langle \dots \rangle_p$ введено в § 4).

Пренебрежем для простоты обменными эффектами, не меняющими качественно ситуации; это позволяет заменить $T + W$ на $\frac{p^2 - p_0^2(x)}{2M} + \varepsilon_F$. Разложение функций θ по коммутаторам операторов p^2 и $p_0^2(x)$ излишним образом усложнило бы последующее рассмотрение, не изменив качественно общего вывода. Поэтому для упрощения выкладок заменим функции θ их квазиклассическими выражениями и пренебрежем разностью $\vec{x}_1 - \vec{x}_3$ в их аргументах (см. § 10). Это даст

$$\sigma \sigma' = \delta_{0,0_3} \int d^3p_1 d^3p_2 \exp \left[i (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) (\vec{x}_1 - \vec{x}_3) \right] \times \\ \times \theta [p_0^2(x_1) - p_1^2] \theta [p_2^2 - p_0^2(x_1)] E,$$

где

$$E = \left\langle \exp \left\{ \frac{it}{2M} [p^2 - p_0^2(x_1)] \right\} \right\rangle_{p_1} \left\langle \exp \left\{ -\frac{it}{2M} [p^2 - p_0^2(x_3)] \right\} \right\rangle_{p_2}.$$

* Второй член в квадратной скобке (15. 19), отвечающий обменным корреляционным эффектам, вносит для сжатых систем малый вклад.

Проводя разложение экспонент в ряд по коммутаторам (см. приложение Б) и ограничиваясь членами первого порядка, найдем

$$E = \exp \left\{ \frac{i t}{2M} [p_1^2 - p_2^2 + p_0^2(x_3) - p_0^2(x_1)] \right\} \times \\ \times \left\{ 1 - \frac{t^2}{4M^2} [\Delta p_0^2 + 2i (\vec{p}_1 + \vec{p}_2) \nabla p_0^2] + \dots \right\}.$$

Разлагая показатель последней экспоненты в ряд по $\vec{x}_1 - \vec{x}_3$ и делая замену $\vec{p}_2 \rightarrow \vec{p}_2 - t \nabla p_0^2 / 2M$, получим после разложения в ряд по ∇p_0^2 :

$$\sigma \sigma' = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \int d^3 p_1 d^3 p_2 \exp [i (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) (\vec{x}_1 - \vec{x}_3)] \times \\ \times \theta [p_0^2(x_1) - p_1^2] \theta [p_2^2 - p_0^2(x_1)] \exp \left[\frac{i t (p_1^2 - p_2^2)}{2M} \right] \times \\ \times \left\{ 1 - \frac{t^2}{4M^2} [\Delta p_0^2 + 2i (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \nabla p_0^2] + \dots \right\}.$$

Оценим вклад второго (квантового) члена в фигурной скобке. Разность $\vec{p}_1 - \vec{p}_2$ по порядку величины равна $|\vec{x}_1 - \vec{x}_3|^{-1} \sim 1/R$; сами величины p_1, p_2 порядка $p_0 \gg 1/R$. Поэтому $p_1^2 - p_2^2 \sim p_0/R$, а величина $t \sim \frac{M}{|p_1^2 - p_2^2|} \sim \frac{MR}{p_0}$. Отсюда с учетом $\Delta p_0^2 \sim p_0^2/x_0^2$, $\nabla p_0^2 \sim p_0^2/x_0$, получим

$$\frac{t^2 \Delta p_0^2}{M^2} \sim \frac{R^2}{x_0^2}, \quad \frac{t^2 (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \nabla p_0^2}{M} \sim \frac{R}{x_0}.$$

Таким образом, вклад квантовых эффектов определяется членами, имеющими порядок $(R/x_0)^2$ и R/x_0 соответственно. Тем самым мы приходим к выводу о том, что использование квазиклассических функций Грина (10. 11), (10. 12) возможно лишь при выполнении условий (15. 17) и (15. 18). При этом система обладает свойством квазиоднородности, что позволяет рассматривать ее как однородную с последующей заменой $\Omega f(\mathbf{q})$ на $\int d\vec{x} f[\mathbf{q}(\mathbf{x})]$.

Физически эту ситуацию можно интерпретировать следующим образом. В сжатых системах основную роль играет область импульсного пространства, непосредственно прилегающая к границе Ферми: эффективная ширина этой области $p_1^2 - p_2^2$ ($p_2^2 > p_0^2 > p_1^2$) составляет по порядку величины $p_0/R \sim dp_0^2/R$. Однако именно вблизи границы Ферми возрастает роль неоднородности системы [50]. Формально это связано с тем, что вклад неоднородности определяется отношением среднего значения коммутаторов типа $[p^2, p_0^2] \sim \Delta p_0^2$ к соответствующей степени величины $p^2 - p_0^2$, в данном случае $(p^2 - p_0^2)^2$. Ясно, что это отношение вблизи

границы Ферми велико даже при малых ξ . Таким образом, в сжатых системах роль неоднородности существеннее, чем в разреженных.

Резюмируя, можно сказать, что при рассмотрении корреляционных эффектов в слабонеоднородных сжатых системах выполнение обычного условия квазиклассичности (15. 17) не упрощает существенным образом задачи. Помимо возникающей при этом нелокальности выражений интегрального типа (в частности, энергии) появляется необходимость учитывать квантовые эффекты *. Задача упрощается лишь при выполнении условия (15. 18).

§ 16. ОТБОР ГЛАВНЫХ ДИАГРАММ

16. 1. Как уже неоднократно подчеркивалось, точное решение задачи многих частиц в подавляющем большинстве случаев оказывается невозможным. Поэтому успех применения теории многих частиц к описанию какого-либо объекта в значительной мере зависит от возможности выявления свойственных задаче малых параметров и их использования в целях ее упрощения.

Именно с этой точки зрения оказываются удобными полевые методы, позволяющие наиболее коротким и простым путем перейти от написания гамильтониана, содержащего малые параметры, к окончательным физическим результатам. И дело при этом не сводится просто к разложению в ряд теории возмущений с оставлением членов низшего порядка. Нередко оказывается необходимым учитывать некоторую бесконечную подсовокупность членов ряда теории возмущений; именно в этой ситуации полевые методы наиболее удобны и оправданы.

Таким образом, перед нами стоит задача: установить ту (конечную или бесконечную) совокупность диаграмм, которые с учетом малости соответствующих параметров играют наиболее важную роль.

Речь должна идти о безразмерных параметрах, составленных из величин, характеризующих систему частиц. К их числу прежде всего относятся параметр взаимодействия α , равный по порядку величины отношению средней энергии взаимодействия пары частиц к их кинетической энергии, и параметр сжатости η , определяемый отношением эффективного радиуса действия сил к среднему расстоянию между частицами. Кроме того, в некоторых случаях надо учитывать эффективное число частиц, параметры, характеризующие внешние поля, относительную концентрацию частиц (для системы частиц разных сортов) и т. д.

* В работе [81], где был сделан этот вывод, количественное рассмотрение проведено некорректным образом. Тем не менее, общий качественный вывод о существенной роли неоднородности в случае, когда отношение R/x_0 не мало по сравнению с единицей, полностью сохраняет свою силу (см. § 27).

Для решения поставленной задачи следует выбрать некоторую величину, характеризующую рассматриваемую систему, и проанализировать относительный вклад различных диаграмм, составляющих эту величину. В качестве такой величины удобно выбрать энергию системы, которая является в значительной мере типичной характеристикой системы: главные с точки зрения энергии диаграммы вносят определяющий вклад и в другие величины, характеризующие систему. По этому поводу необходимо сделать лишь следующее замечание. Если рассмотреть выражение для энергии в импульсном представлении, то нетрудно убедиться в том, что в него вносят основной вклад значения энергии и импульса порядка соответственно энергии Ферми и граничного импульса. Поэтому намеченная программа не приведет к успеху в тех (относительно редких) случаях, когда нас специально интересуют выделенные значения энергии ϵ' и импульса p' , отличные от ϵ_F и p_0 . В этом случае необходим специальный анализ, опирающийся на учет дополнительных параметров ϵ'/ϵ_F и p'/p_0 .

Для исследования корреляционной энергии низшего порядка используем соотношение (15. 22). Анализ диаграмм высшего порядка следует вести, используя собственно энергетическую часть $\Sigma(\vec{p}, \epsilon)$: главной с точки зрения энергии является та совокупность диаграмм, которая вносит определяющий вклад в величину $\Sigma(p_0, \epsilon_F)$.

Вместо самой энергии удобнее иметь дело с безразмерной величиной

$$\beta = ME/Np_0^2 \sim ME/\Omega p_0^5. \quad (16. 1)$$

При этом для корреляционной части энергии параметр $\beta \sim \frac{M \Sigma(p_0, \epsilon_F)}{p_0^2}$, что легко вывести из соотношения (15. 14').

16. 2. Целесообразно начать с оценки параметра β для самосогласованного взаимодействия. При этом мы частично воспроизведем результаты, полученные в § 5—7.

В качестве параметра β следует выбрать отношение $\beta_{пр} \sim \frac{MB}{p_0^2}$ для прямого и $\beta_{об} \sim MA/p_0^2$ для обменного взаимодействия.

Из выражения (4. 30") имеем $\beta_{пр} \sim \frac{Mg \int d\vec{\xi} V}{p_0^2}$. Отсюда для короткодействующих сил в случае сжатой системы можно написать

$$\beta_{пр} \sim \alpha \eta^3. \quad (16. 2)$$

Эта величина может оказаться значительной для сжатых систем даже в случае малого α . Соответствующая причина уже обсуждалась в § 1 и 5. Для разреженной системы имеем просто

$$\beta_{пр} \sim \alpha. \quad (16. 2')$$

В случае однородной системы с кулоновским взаимодействием

$$\beta_{\text{пр}} = 0 \quad (16. 3)$$

вследствие полной компенсации зарядов системы и фона (см. § 5). Если же система неоднородна, то $\int d\vec{\xi} V$ «обрезается» на расстоянии порядка x_1 и

$$\beta_{\text{пр}} \sim \frac{x_1^2}{da_0} \sim \alpha (x_1/d)^2.$$

Отношение x_1/d имеет смысл числа частиц, приходящихся на длину характерной неоднородности задачи. Обычно это отношение порядка $Z^{1/3}$, откуда

$$\beta_{\text{пр}} \sim \alpha Z^{2/3}. \quad (16. 4)$$

И в этом случае $\beta_{\text{пр}}$ может быть много больше α .

Переходим к оценке роли обменного самосогласованного взаимодействия. Исходя из соотношения (4. 33'), имеем $A \sim \int d\vec{p} f v \sim \sim \rho \int d\vec{\xi} V \exp [i (\rho_0 \xi)]$. В разреженных системах $(\rho_0 \xi) \ll 1$, и мы, возвращаемся к той же оценке, что и для $\beta_{\text{пр}}$:

$$\beta_{\text{об}} \sim \beta_{\text{пр}}. \quad (16. 5)$$

В сжатых системах экспонента $\exp (i \rho_0 \xi)$ сильно осциллирует и результат определяется поведением потенциала при малых ξ . Если при этом $V (\xi) \sim V_0 (\xi/R)^n$ ($n > -3$), то $A \sim V_0 (d/R)^n$ и

$$\beta_{\text{об}} \sim \alpha / \eta^n. \quad (16. 6)$$

В частности, для прямоугольной ямы, где $n = 0$,

$$\beta_{\text{об}} \sim \alpha. \quad (16. 7)$$

Для кулоновских систем, где $n = -1$, величина $A \sim e^2/d$ и аналогично

$$\beta_{\text{об}} \sim \alpha. \quad (16. 8)$$

16. 3. Оценим вклад членов ряда теории возмущений. Начнем с рассмотрения члена низшего порядка. Используя выражения (15. 22) и (16. 1), имеем

$$\beta \sim \frac{M^2}{\rho_0^5} \int d^3 \rho_1 d^3 \rho_2 d^3 k \frac{n_{\rho_1} n_{\rho_2} (1 - n_{\vec{\rho}_1 + \vec{k}}) (1 - n_{\vec{\rho}_2 - \vec{k}})}{(\vec{\rho}_1 + \vec{k})^2 + (\vec{\rho}_2 - \vec{k})^2 - \rho_1^2 - \rho_2^2} |v(\vec{k})|^2. \quad (16. 9)$$

Для простоты считаем V функцией только координат и отбрасываем обменный корреляционный член, содержащий оператор \mathcal{J}^j . Кроме того, закон дисперсии частиц выбран квадратичным. Сделанные упрощения не меняют порядка величины результата.

Рассмотрим сначала разреженные системы с короткодействующими силами. Условие разреженности означает, что характерный передаваемый импульс $k \sim 1/R \gg \rho_0$, т. е. $k/\rho_0 \sim \eta^{-1} \gg 1$.

Поэтому пренебрегая величиной $p_{1,2}$ по сравнению с k , находим

$$\beta \sim M^2 p_0 \int dk |v(\vec{k})|^2 \sim \frac{M^2 p_0^2 V_0^2 R^3}{\eta}.$$

Здесь учтено, что $v \sim \int d\xi V \sim V_0 R^3$. Наконец, вспомнив определение параметра α , получаем окончательно

$$\beta \sim \alpha^2 / \eta. \quad (16. 10)$$

16. 4. Переходим к рассмотрению сжатых систем. Проанализируем сначала область интегрирования в выражении (16. 9), учитывая, что в силу условия сжатости $k \ll p_0$. При этом одновременное выполнение условий $p_{1,2} < p_0$ и $|\vec{p}_{1,2} \pm \vec{k}| > p_0$ возможно, очевидно, только для значений $p_{1,2}$, мало отличающихся от p_0 . Полагая $p_{1,2} = p_0 (1 - \alpha_{1,2})$, можно написать (x —косинус угла между \vec{p} и \vec{k})

$$\left. \begin{aligned} kx_1/p_0 > \alpha_1 > 0 & \quad x_1 > 0, \\ -kx_2/p_0 > \alpha_2 > 0 & \quad x_2 < 0. \end{aligned} \right\} \quad (16. 11)$$

Сокращение эффективной области интегрирования приводит к уменьшению величины вклада корреляционных эффектов, причем это касается не только члена низшего порядка, но и всех остальных членов ряда теории возмущений. Поэтому, чем сильнее сжата система, тем более точным оказывается приближение Хартри — Фока.

Этот эффект «подавления» корреляции является прямым следствием принципа Паули [75, 82]. Каждая пара взаимодействующих частиц, импульсы которых первоначально лежали внутри сферы Ферми, в результате взаимодействия обязательно должна покинуть пределы сферы, так как все состояния внутри нее уже заняты. Ясно вместе с тем, что, поскольку в сжатых системах частицы могут передавать друг другу лишь малый импульс, способными к взаимодействию окажутся только те частицы, импульсы которых непосредственно прилегают к сфере Ферми.

Переходим к оценке интеграла (16. 9) для сжатой системы. Учитывая условия (16. 11), можно написать

$$\begin{aligned} & \int d^3 p_1 d^3 p_2 [(\vec{p}_1 + \vec{k})^2 + (\vec{p}_2 - \vec{k})^2 - p_1^2 - p_2^2]^{-1} \sim \\ & \sim p_0^3 \int_0^1 dx_1 \int_0^{\frac{kx_1}{p_0}} da_1 \int_{-1}^0 dx_2 \int_{-kx_2/p_0}^0 da_2 [k(x_1 - x_2)]^{-1} \sim k p_0^4. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\beta = \frac{M^2}{p_0^2} \int_0^{p_0} dk k^3 |v(\vec{k})|^2. \quad (16. 12)$$

Верхний предел следует положить по порядку равным p_0 .

При значениях $k \gg 1/R$ величина $|v(k)|^2$ обычно ведет себя как $1/k^4$. Так обстоит дело в наиболее интересных случаях: для прямоугольной ямы, для потенциала Юкава *. Точнее говоря, мы должны написать $v^2(k) \sim V_0^2 R^2/k^4$. Отсюда, учитывая, что в интеграле (16. 12) существенны значения $k \sim p_0 \gg 1/R$, получим

$$\beta \sim \alpha^2 \eta^2 \ln \eta. \quad (16. 13)$$

Для этого выражения характерно наличие логарифмического члена.

Особенно ярко проявляется это свойство в сжатых системах с кулоновским взаимодействием. Подставляя в выражение (16. 12) $v(k) \sim e^2/k^2$, находим

$$\beta \sim \alpha^2 \int_0^{p_0} \frac{dk}{k}, \quad (16. 14)$$

т. е. величину, логарифмически обращающуюся в бесконечность. Эта трудность имеет место лишь в низшем порядке теории возмущений (точные решения уравнения Шредингера никаких расходимостей содержать не могут); в дальнейшем будет выяснено, что за счет перераспределения частиц под влиянием корреляционных воздействий кулоновский потенциал фактически экранируется на расстоянии радиуса Дебая, и эффективная величина $v(k)$ утрачивает особенность в точке $k = 0$, т. е. силы теряют свой дальнедействующий характер.

Представляет интерес вопрос о том, как влияет неоднородность в распределении частиц на характер сходимости интеграла в соотношении (16. 14). Ясно, что эта трудность в общем будет смягчаться, поскольку частицы, рассеиваясь на неоднородностях, обмениваются с ними импульсом, что, грубо говоря, выводит частицы из области малых передач импульсов. Расчет действительно подтверждает эти соображения [81]. Если длина, на которой заметным образом меняется распределение частиц, становится меньше радиуса Дебая, то расходимость выражения (16. 14) исчезает. Еще ярче это обстоятельство проявляется на примере ограниченных в пространстве систем. В этом случае импульсы имеют нижнюю границу, и интеграл (16. 14) «обрезается» автоматически при $k \sim 1/r$, где r — радиус системы.

16. 5. Перейдем теперь к оценке роли диаграмм высшего порядка. Рассмотрим диаграммы собственно энергетической части третьего порядка (рис. 25). При этом по сравнению с диаграммой Σ второго порядка добавляются одна линия взаимодействия и две линии частиц или частицы и дырки.

Покажем, что для разреженных систем основную роль играет диаграмма, изображенная на рис. 25, а. Это утверждение следует

* Это свойство, естественно, не является общим; для потенциала $\exp(-\mu r)$, например, $v^2(k) \sim 1/k^8$. Подробнее см. § 27.

из того факта, что рассматриваемая диаграмма имеет минимальное (равное единице) число дырок. Поскольку по импульсам дырки

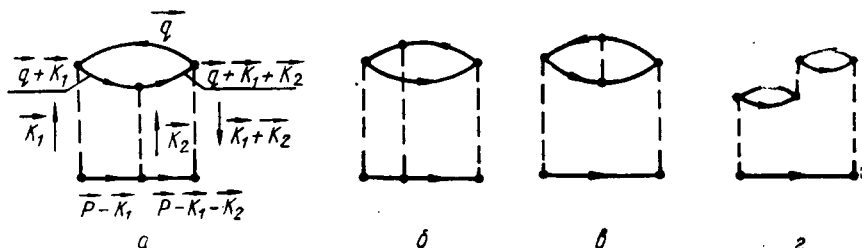


Рис. 25

интегрирование ведется до малой (сравнительно с k) величины p_0 , ясно, что остальные диаграммы дадут малый (при малом η) вклад.

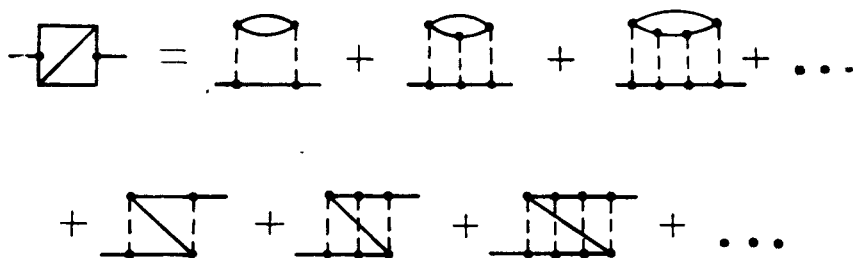


Рис. 26

Если рассматривать диаграммы более высокого порядка, то и там по аналогичным причинам наиболее существенную роль будут играть диаграммы, в которых содержится минимальное число дырок. Таким образом, в разреженных системах достаточно учесть лишь следующую бесконечную совокупность диаграмм собственно энергетической части Σ (рис. 26). Общее свойство этих диаграмм состоит в том, что все линии взаимодействия соединяют одну и ту же пару линий частиц.

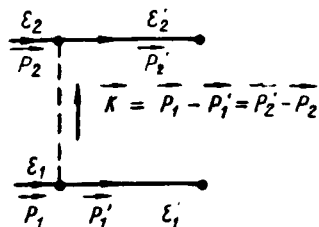


Рис. 27

Для оценки вклада каждой из этих диаграмм можно использовать правила Фейнмана. При переходе от диаграммы n -го порядка к диаграмме $(n+1)$ -го порядка добавляется лишнее звено, изображенное на рис. 27. Согласно правилам Фейнмана, в выражение для Σ нужно ввести дополнительно следующую комбинацию:

$$Q_1 \sim \int d^4 p_1' d^4 p_2' \delta^4(p_1 + p_2 - p_1' - p_2') v(\vec{p}_1 - \vec{p}_1') \times \\ \times G_c(\vec{p}_1', \epsilon_1) G_0(\vec{p}_2', \epsilon_2).$$

Интегрируя по ε'_1 и ε'_2 , находим

$$Q_1 \sim M \int \frac{d^3 p'_1 d^3 p'_2 v(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1)}{p_1'^2 + p_2'^2 - p_1'^2 - p_2'^2} (1 - n_{p_1'}) (1 - n_{p_2'}) \times \\ \times \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}'_1 - \vec{p}'_2). \quad (16.15)$$

Переходя далее к переменной $\vec{k} = \vec{p}_1 - \vec{p}'_1$ и учитывая $k \gg p_0$, находим

$$Q_1 \sim M \int_{p_0}^{\infty} d^3 k \frac{v(k)}{k^2} \sim \alpha/\eta \sim \alpha',$$

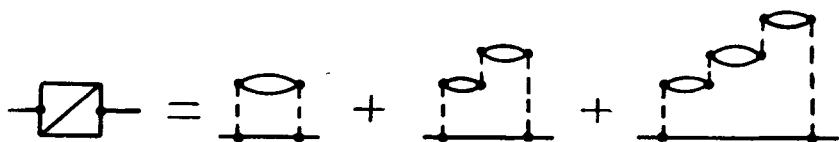


Рис. 28

где α' — параметр борновского разложения. Таким образом, вклад интересующих нас диаграмм имеет вид

$$\beta \sim \alpha \sum_{n=1}^{\infty} C_n (\alpha')^n, \quad (16.16)$$

где C_n — некоторые численные коэффициенты. Что же касается вклада отброшенных диаграмм, то он оказывается в каждом порядке теории возмущений в η^{-1} раз меньше.

Остановимся на физической интерпретации полученных результатов. Из рис. 26 видно, что фактически следует учитывать корреляцию переменных лишь каждой из пар частиц, поскольку все линии взаимодействия связывают линии только двух частиц. В таких случаях говорят о парной корреляции частиц. Это обстоятельство имеет совершенно ясный физический смысл. Дело в том, что из-за малости параметра η одновременное попадание трех и более частиц в сферу действия сил (а это является необходимым условием появления тройных и более сложных корреляций) маловероятно.

16. 6. Наиболее важную роль в сжатых системах играют диаграммы типа, изображенной на рис. 25, г. Аналогично из числа диаграмм высшего порядка наибольший вклад дают диаграммы, изображенные на рис. 28. Общей чертой этих диаграмм является наличие максимального числа замкнутых петель, благодаря чему все передаваемые импульсы оказываются равными друг другу.

Выделенный характер этих диаграмм объясняется тем, что в сжатых системах передаваемый импульс k мал по сравнению с граничным импульсом p_0 . Фурье-образ потенциала $v(k)$ падает

с увеличением k , причем это падение имеет характер $v(k) \sim k^{-2}$ при $k \gg 1/R$ и, в частности, при $k \sim p_0$ (см. раздел 16. 4). Таким образом, наибольший вклад дают диаграммы с наименьшим значением импульса передачи. Таким свойством и обладают диаграммы рис. 28, у которых все импульсы передачи одинаковы и равны k . В то же время диаграмма, скажем, рис. 25, б имеет один из импульсов передачи (средний) порядка $p_0 \gg k$.

Проведем количественное сравнение вклада диаграмм рис. 28. При переходе от n -й к $(n + 1)$ -й диаграмме добавляется дополнительное звено, изображенное на рис. 29. Соответствующее ему выражение после интегриации по энергиям принимает вид

$$Q_2 \sim M \int d^3 p_1' d^3 p_2' \frac{v(\vec{p}_1' - \vec{p}_2') n_{p_1'} (1 - n_{p_2'})}{p_1'^2 + p_2'^2 - p_2'^2 - p_1'^2} \times \\ \times \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_2' - \vec{p}_1'). \quad (16. 17)$$

Вводя переменную $\vec{k} = \vec{p}_1' - \vec{p}_2' = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ и проводя оценки, аналогичные выполненным в разделе 16. 4, с учетом $k \ll p_0$ получим

$$Q_2 \sim M p_0 v(k).$$

Сумма диаграмм рассматриваемого типа дает, таким образом, следующий вклад

$$\beta \sim \frac{M^2}{p_0^2} \int_0^{p_0} dk k^3 |v(k)|^2 f[M p_0 v(k)], \quad (16. 18)$$

где $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n$; C_n — некоторые

коэффициенты; явное выражение $f(x)$ будет приведено в гл. IV. Забегая вперед, заметим, что при $x \rightarrow \infty$ $f(x) \rightarrow x^{-1}$, при $x \rightarrow 0$ $f(x) \rightarrow \text{const}$.

Введем величину k_0 , определяемую равенством

$$M^2 p_0^2 |v(k_0)|^2 \sim 1. \quad (16. 19)$$

Здесь нужно различать несколько случаев. Функция $|v(k)|^2$ в общем падает с увеличением k . Поэтому если $M^2 p_0^2 |v(\frac{1}{R})|^2 \ll 1$, то равенство (16. 19) вообще не может быть выполнено, и рассматриваемое неравенство остается справедливым всегда. При этом сумма в выражении для $f(x)$ фактически сводится к своему первому члену. Таким образом, при

$$\alpha \eta^3 \ll 1$$

достаточно учесть лишь первую корреляционную поправку, что приведет к результатам раздела 16. 4.

Второй, наиболее важный случай, соответствует тому, что определяемая выражением (16. 19) величина k_0 заключена между $1/R$ и ρ_0 . Учитывая соотношение $v^2(k) \sim V_0^2 R^2/k^4$, имеем

$$k_0 \sim (MV_0 \rho_0 R)^{1/2} \sim (\alpha \eta)^{1/2} \rho_0. \quad (16. 20)$$

Условие $1/R \ll k_0 \ll \rho_0$ принимает вид

$$\alpha \eta^3 \gg 1, \quad \alpha \eta \ll 1.$$

Оценим величину β для этого случая, учитывая, что в области $0 < k < 1/R$ $v(k) \sim V_0 R^3$, $M\rho_0 v \sim \alpha \eta^3 \gg 1$, $f \sim 1/(\alpha \eta^3)$; в области $1/R < k < k_0$ $v(k) \sim V_0 R/k^2$, $M\rho_0 v \sim k_0^2/k^2$, $f \sim k^2/k_0^2$; в области $k_0 < k < \rho_0$ $M\rho_0 v \sim k_0^2/k^2$, $f \sim 1$. Вклад в интеграл (16. 18) первой области составляет $\sim \alpha/\eta$, второй $\sim \alpha^2 \eta^2$ и третьей $\sim \alpha^2 \eta^2 \ln(\alpha \eta)$. Наиболее важен, очевидно, вклад области $k_0 < k < \rho_0$, который равен

$$\beta \sim \alpha^2 \eta^2 \ln(\alpha \eta). \quad (16. 21)$$

Эта величина мала по сравнению с единицей.

В принципе возможен также случай

$$k_0 > \rho_0, \quad \alpha \eta > 1. \quad (16. 22)$$

Однако все приведенные выше соображения, основанные на малости эффективного значения k по сравнению с ρ_0 , теряют в этом случае свою силу. В частности, подлежат учету все диаграммы теории возмущений. Физически это означает (см. § 27), что экранированный за счет корреляционных взаимодействий потенциал V перестал быть дальнедействующим (по сравнению с расстоянием между частицами d). Другими словами, рассматриваемая система при выполнении неравенства (16. 22) по существу не относится к разряду сжатых систем.

16. 7. Рассмотрим кулоновские сжатые системы. Для них при всех значениях k $v(k) \sim e^2/k^2$ и $M\rho_0 v \sim \rho_0/(a_0 k^2)$. Разбивая интеграл (16. 18) на две области $k < k_0$ и $k > k_0$, где согласно выражению (16. 19)

$$k_0 \sim (\rho_0/a_0)^{1/2}, \quad (16. 23)$$

имеем в первой области $M\rho_0 v \sim k_0^2/k^2 \gg 1$, $f \sim k^2/k_0^2$ и

$$\beta_1 \sim (a_0 \rho_0)^{-2} \sim \alpha^2.$$

Мы видим, что расходимость при малых k действительно устраняется.

Во второй области $M\rho_0 v \ll 1$ и $f \sim 1$, откуда

$$\beta_2 \sim \alpha^2 \ln(\rho_0/k_0).$$

Таким образом, основной вклад дает область $k_0 < k < \rho_0$ и

$$\beta \sim \alpha^2 \ln(1/\alpha). \quad (16. 24)$$

Ситуация, как мы видим, во многом напоминает рассмотренную в предыдущем разделе. Но это не удивительно; ведь сжатая система с короткодействующими силами имеет большой радиус действия этих сил (сравнительно с расстоянием между частицами), что сближает ее с кулоновской системой.

Величина k_0 называется импульсом Дебая, обратная ей величина

$$R_0 \sim (a_0/\rho_0)^{1/2} \quad (16. 25)$$

называется радиусом дебаевского экранирования.

Возвратимся теперь к соотношению (16. 18) и разложим формально функцию f в ряд по ее аргументу. Член разложения n -го порядка дает вклад

$$\beta_n \sim \frac{\rho_0^{n-2}}{a_0^{n+2}} \int \frac{dk}{k^{2n+1}} \sim \frac{\rho_0^{n-2}}{a_0^{n+2} k_{эфф}^{2n}}, \quad \beta_0 \sim (a_0 \rho_0)^{-2} \ln(\rho_0/k_{эфф}).$$

Здесь $k_{эфф}$ — эффективный нижний предел интеграции по k . Эта величина, очевидно, совпадает с дебаевским импульсом k_0 : $k_0 \sim (\rho_0/a_0)^{1/2}$. Подстановка этого выражения в β_n показывает, что все члены разложения β вносят одинаковый вклад. Это обстоятельство необходимо для взаимной компенсации расходимостей β_n и появления эффективного «обрезания» интеграла (16. 18).

Возможны случаи, когда этот интеграл фактически «обрезается» по другим причинам. Так обстоит дело, например, в ограниченной в пространстве системе. Импульсы передачи $k < 1/r$ (r — размер системы) оказываются подавленными; величина $k_{эфф}$ становится, таким образом, равной наибольшей из величин $1/r$ и k_0 . Если размеры системы меньше радиуса дебаевского экранирования R , т. е. $1/r \gg k_0$, то $\beta_n \sim \alpha^2 (k_0 R)^{2n}$ и основную роль играет член с $n = 0$. Таким образом, при выполнении условия

$$\eta \sim (a_0/d)^{1/2} \gg N^{1/2}, \quad (16. 26)$$

где N — число частиц в системе ($r \sim dN^{1/3}$), основную роль играет диаграмма низшего порядка, дающая вклад

$$\beta \sim \alpha^2 \ln N. \quad (16. 27)$$

Вклад диаграммы n -го порядка $\beta_n \sim \alpha^2 (N^{1/3}/\eta)^n$.

В отличие от разреженных систем, где основную роль играют парные корреляции между частицами, в рассматриваемом случае доминируют многочастичные, коллективные корреляции. Это видно уже из диаграммы рис. 28: в каждом порядке теории возмущений связано взаимодействием максимально возможное число частиц. Объясняется это большой величиной радиуса действия сил по сравнению с расстоянием между частицами.

16. 8. Возвратимся к разреженным системам. В разделе 16. 5 было выяснено, какие диаграммы в таких системах являются главными и какой порядок величины имеют корреляционные эффекты.

Практически удобно идти другим путем: уже на первом этапе заменить истинный потенциал взаимодействия введенным в § 1 псевдопотенциалом *

$$V_{\text{эфф}}(\vec{r}) = \frac{4\pi l}{M} \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r}\right) \quad (16. 28)$$

и произвести отбор главных диаграмм, отвечающих этому псевдопотенциалу. Такой подход помимо большой экономии труда позволит выявить случаи, когда проведенный в разделе 16. 5 анализ оказывается некорректным.

Параметр взаимодействия α для потенциала (16. 28), согласно результатам § 1, равен

$$\alpha \sim l/d \sim lp_0. \quad (16. 29)$$

Параметр сжатости в данном случае вообще равен нулю, и система описывается единственным параметром α .

Переходя к оценкам диаграмм, отвечающих потенциалу (16. 28), воспользуемся готовыми формулами (16. 9), (16. 15) и (16. 17). При этом, однако, придется соблюдать известную осторожность.

Запишем формулу (16. 9) в следующем виде:

$$\beta \sim \frac{M^2}{\rho_0^5} \int d^3 p_1 d^3 p_2 n_{p_1} n_{p_2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 V_{\text{эфф}}(r_1) V_{\text{эфф}}(r_2) I(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

где

$$I(\vec{r}) = \int d^3 k \exp(-i\vec{k}\vec{r}) \frac{(1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}})(1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}})}{(\vec{p}_1 + \vec{k})^2 + (\vec{p}_2 - \vec{k})^2 - p_1^2 - p_2^2}.$$

Здесь мы заменили фурье-образ самим потенциалом. Рассмотрим интеграл

$$I_0(\vec{r}) = \int \frac{d^3 k \exp(-i\vec{k}\vec{r})}{(\vec{p}_1 + \vec{k})^2 + (\vec{p}_2 - \vec{k})^2 - p_1^2 - p_2^2}$$

в области малых r . Несложный анализ показывает, что I_0 состоит из двух неисчезающих при $r \rightarrow 0$ членов, один из которых имеет особенность $1/r$, а другой пропорционален $\frac{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \vec{r}}{r}$.

Если теперь в выражение для β вместо I подставим величину I_0 , то получим нулевой результат. Это связано с конкретным видом

* Здесь l — длина рассеяния, связанная с амплитудой рассеяния соотношением

$$\alpha = -l/(1 + ikl).$$

Суммирование выделенных в разделе 16. 5 диаграмм как раз приводит к фактической замене истинного потенциала псевдопотенциалом (16. 28). Это будет показано в § 26.

потенциала $V_{\text{эфф}}$, который, как уже отмечалось в § 1, устраняет члены порядка $1/r$. Что же касается второго члена I_0 , то он исчезает в результате усреднения по углам. Поэтому мы можем просто заменить I на $I - I_0$. Но эта разность является уже регулярной функцией $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, что позволяет опустить оператор $1 + r(\partial/\partial r)$ в выражении для $V_{\text{эфф}}$. Окончательно имеем

$$\beta \sim \frac{l^2}{p_0^5} \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 k \frac{n_{p_1} n_{p_2} \left[\left(1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}} \right) \left(1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}} \right) - 1 \right]}{\left(\vec{p}_1 + \vec{k} \right)^2 + \left(\vec{p}_2 - \vec{k} \right)^2 - p_1^2 - p_2^2}.$$

В этом интеграле характерные значения $p_{1,2}$ и k порядка p_0 , поэтому окончательно в низшем порядке теории возмущений мы имеем

$$\beta \sim l^2 p_0^2 \sim \alpha^2. \quad (16. 30)$$

Оценим интеграл (16. 15), который можно привести к виду

$$Q_1 \sim M \int_{p_0}^{\infty} \frac{d^3 k}{k^2} v(k) \sim \int d\vec{r} l \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} \right) \int_{p_0}^{\infty} \frac{d^3 k}{k^2} \exp(-i\vec{k}\vec{r}).$$

Входящий сюда интеграл по k при малых r имеет вид $1/r - \frac{2}{\pi} p_0 + O(r)$. Учитывая свойства оператора $1 + r \frac{\partial}{\partial r}$, находим

$$Q_1 \sim p_0 l \sim \alpha. \quad (16. 31)$$

Аналогичную оценку имеет интеграл (16. 17). В области $k < p_0$, которая является главной,

$$Q_2 \sim M p_0 v \sim p_0 l \sim \alpha. \quad (16. 32)$$

(при $k \gg p_0$ $Q_2 \sim \alpha (p_0^2/k^2)$).

Таким образом, мы приходим к выводу, что псевдопотенциал не создает выделенных диаграмм. Все диаграммы данного порядка теории возмущений вносят одинаковый (по крайней мере буквенно) вклад. Этот результат неудивителен, поскольку имеется лишь один безразмерный параметр α .

Мы видим, далее, что при условии

$$\alpha \ll 1,$$

когда длина и амплитуда рассеяния малы по сравнению с расстоянием между частицами, можно ограничиться учетом лишь диаграммы низшего порядка. Это приводит к тем же результатам, которые получаются при суммировании диаграмм, выделенных в разделе 16. 5.

Ситуация чрезвычайно усложняется при $\alpha \geq 1$, когда

$$d/R \ll 1, \quad l/R \geq 1.$$

Вклад членов ряда теории возмущений $\left(\beta \sim \frac{2ME}{N\rho_0^2} \right)$

Тип взаимодействия	Тип системы	Параметр сжатости μ	Параметр взаимодействия α	Соотношение между α и η	Вклад самосогласованного взаимодействия	Вклад обменных эффектов $\rho_{\text{обм}}/\rho_{\text{сам}}$	Главные диаграммы корреляции	Вклад корреляционных эффектов $\rho_{\text{кор}}$	Относительный вклад $\rho_{\text{кор}}/\rho_{\text{сам}}$	Относительный вклад $\rho_{\text{кор}}/\rho_{\text{сам}}$	Примечания
Короткодействующие силы	Разреженная система	$R \frac{d}{\rho} \ll 1^*$	$MV_0 R^3$	$\frac{\alpha}{\eta} \ll 1$	α	1	Рис. 22, а и б	α^2/η	α/η	$V(r) \sim V_0 \quad (r < R)$ $V(r) = 0 \quad (r > R)$ $\alpha/\eta \sim MV_0 R^2$	
				$\frac{\eta}{\alpha} \sim 1$	α	1	Рис. 26	α^2/η	α/η		
				$\alpha \ll 1$	α	1	Рис. 22, а и б	α^2	α	$V(r) = \frac{4\pi l}{M} \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} \right)$ l — длина рассеяния	
Сжатая система	Сжатая система	$R \frac{d}{\rho} \gg 1$	$MV_0 d^2$	$\alpha\eta^3 \ll 1$	$\alpha\eta^3$	η^{-n-3}	Рис. 22, а	$\alpha^2 \eta^2 \ln \eta$	$\frac{\alpha \ln \eta}{\eta}$	$V(r) \sim V_0 \quad (r < R)$ $V(r) = 0 \quad (r > R)$ $V(r) \sim r^n \quad (r \rightarrow 0)$	
				$\alpha\eta^3 \gg 1$	$\alpha\eta^3$	η^{-n-3}	Рис. 28	$\alpha^2 \eta^2 \times \ln(\alpha\eta)$	$\frac{\alpha \ln(\alpha\eta)}{\eta}$		
				$\alpha\eta \geq 1$	$\alpha\eta^3$	η^{-n-3}	Все	—	—	—	
Кулоновы силы	Сжатая система	$\left(\frac{R}{a_0} \right)^{1/2} \gg 1$	$\frac{d}{a_0} \ll 1$	$\alpha \sim \eta^{-2}$	α	1	Рис. 28	$\alpha^2 \ln \alpha$	$\alpha \ln \alpha$	Однородная система $a_0 = \frac{1}{Mc^2}$	
				$\alpha \ll N^{-2/3}$	$\alpha Z^{2/3}$	$Z^{-2/3}$	Рис. 28	$\alpha^2 \ln \alpha$	$\frac{\alpha \ln \alpha}{Z^{2/3}}$	Неоднородная система (Z — заряд ядра)	
				$\alpha \ll N^{-2/3}$	$N^{2/3} \alpha$	$N^{-2/3}$	Рис. 22, а	$\alpha^2 \ln N$	$\frac{\alpha \ln N}{N^{5/3}}$	Ограниченная система (N — число частиц)	

* d — среднее расстояние между частицами.

Этот случай отвечает резонансной ситуации, рассмотренной в § 1. Здесь существенны все диаграммы теории возмущений, а это сильно усложняет решение задачи*.

Полученные в этом параграфе результаты (табл. 1) важны при решении конкретных задач теории многих частиц и будут использованы в дальнейшем для вывода приближенных количественных соотношений. В тех случаях, когда малость характеризующих систему параметров выявлена недостаточно четко, учетом соответствующих им главных диаграмм ограничиться нельзя. Однако суммирование этих диаграмм дает удобное исходное приближение, опираясь на которое можно провести дальнейшее улучшение результата. На следующем этапе можно ограничиться учетом опять-таки не всех, а лишь определенной подсовкупности диаграмм. Так, в случае разреженной системы речь идет о диаграммах, содержащих одну лишнюю линию дырки; для сжатых систем это будут диаграммы, в которых одна из линий взаимодействия имеет импульс передачи порядка p_0 .

Специального анализа требуют устойчивые системы с силами притяжения, где происходит перестройка основного состояния системы вблизи границы Ферми за счет образования куперовских пар. Это обстоятельство, мало сказываясь на энергии системы, существенно для объяснения явления сверхпроводимости [7—9].

§ 17. ПРИЛОЖЕНИЯ К ТЕОРИИ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ

17. 1. Рассмотрим простейшую систему многих частиц — двухэлектронный атом или ион (He , Li^* , Be^{**} , B^{***} и т. п.). При сравнении опытных данных по энергиям электронной оболочки этих атомов с результатами соответствующих вычислений в приближении Хартри — Фока обнаруживается некоторая разница, которая объясняется, очевидно, корреляционными эффектами.

Мы не будем касаться принятых в спектроскопии методов вычисления этой разницы (имеются, в частности, в виду методы смещения конфигураций и неполного разделения переменных), а покажем, как использовать для этой цели развитую в предыдущих параграфах теорию возмущений [83].

Рассматривая общий член интересующего нас изоэлектронного ряда (число электронов $N = 2$, заряд ядра Z), оценим величину параметров сжатости и взаимодействия. Среднее расстояние между частицами d по порядку величины равно a_0/Z и из выражений (1. 25) и (1. 28)

$$\eta \sim Z^{1/2}, \quad \alpha \sim Z^{-1}. \quad (17. 1)$$

* Неприменимость в данном случае анализа, проведенного в разделе 16. 5, связана по существу с расходимостью (или плохой сходимостью) рядов, представляющих собой суммы вкладов различных диаграмм теории возмущений, отвечающей истинному потенциалу взаимодействия.

Таким образом, при больших Z рассматриваемая система принадлежит к классу сжатых систем со слабым взаимодействием. Общим свойством таких систем, как уже говорилось в § 16, является малый вклад корреляционных эффектов. Фактически этот вывод относится и к случаю $Z = 2$, что объясняется, видимо, благоприятной величиной соответствующих численных коэффициентов.

Рассматриваемая система относится к разряду ограниченных систем, для которых при больших Z выполнено условие (16. 26): $d/a_0 \sim Z^{-1} \ll N^{-2/3}$. Поэтому можно ограничиться диаграммой низшего порядка; вклад диаграмм n -го порядка составляет величину $\sim Z^{-n}$.

17. 2. Будем исходить из выражения (15. 16). Ограничимся рассмотрением атома в основном состоянии, для которого $\chi_{\mu_1} = \delta_{\sigma, 1/2} \chi_0(\vec{r})$, $\chi_{\mu_2} = \delta_{\sigma, -1/2} \chi_0(\vec{r})$. Обменные члены при этом тождественно исчезают, поскольку частицы находятся в состояниях с противоположными спинами. В результате получаем

$$E - E_0 = - \sum_{\substack{n, m \\ n \neq 0, m \neq 0}} \frac{|\langle 0, 0 | e^2/r | m, n \rangle|^2}{\varepsilon_m + \varepsilon_n - 2\varepsilon_0}, \quad (17. 2)$$

где

$$\langle i, j | e^2/r | m, n \rangle = e^2 \int \frac{d\vec{x} d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \chi_i^*(x) \chi_j^*(x') \chi_m(x) \chi_n(x').$$

Сумму, в которой пропущены оба состояния $n = 0$ и $m = 0$, можно записать в виде

$$\sum_{\substack{n \neq 0 \\ m \neq 0}} = \sum'_{m, n} - \sum_{m=0} - \sum_{n=0},$$

где штрих означает пропуск только состояния с $m = n = 0$. Тогда

$$E - E_0 = E_{\text{кул}} - 2E_{\text{сам}}, \quad (17. 3)$$

где

$$E_{\text{кул}} = - \sum'_{n, m} \frac{|\langle 0, 0 | e^2/r | m, n \rangle|^2}{\varepsilon_m + \varepsilon_n - 2\varepsilon_0}$$

поправка к энергии за счет чисто кулоновского взаимодействия по обычной теории возмущений;

$$E_{\text{сам}} = - \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0 | B | n \rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_0} \quad (17. 4)$$

поправка к энергии за счет самосогласованного потенциала

$$B(r) = e^2 \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} |\chi_0(x')|^2.$$

Из приведенных соотношений следует, что

$$E_{\text{кул}} < 0, \quad E_{\text{сам}} < 0; \quad E_{\text{кул}} < E - E_0 < 0, \quad (17.5)$$

что подтверждает известный из вариационного принципа вывод об отрицательном знаке корреляционной энергии.

17. 3. С достаточной точностью вместо волновых функций приближения Хартри можно использовать функции так называемого водородоподобного приближения, в котором самосогласованное взаимодействие между электронами заменяется специально подобранной экранировкой ядра. Эти волновые функции являются собственными функциями одноэлектронной задачи в поле ядра с зарядом $Z^* = Z - 5/16$ [29]. При этом

$$\chi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (Z^*/a_0)^{3/2} \exp(-Z^*r/a_0) \varepsilon_0 = -\frac{(Z^*)^2}{2} e^2/a_0.$$

Что же касается возбужденных состояний, то для них

$$\chi_n(r) = (Z^*/a_0)^{3/2} f_n(Z^*r/a_0), \quad \varepsilon_n \sim (Z^*)^2 e^2/a_0,$$

где f_n — некоторая известная функция. Более точные выражения нам не понадобятся.

Делая замену $r \rightarrow r/Z^*$, легко убедиться, что матричный элемент $\langle i, j | e^2/r | m, n \rangle$ пропорционален величине Z^* , а энергетический знаменатель — величине $(Z^*)^2$. Поэтому величины $E - E_0$, $E_{\text{кул}}$ и $E_{\text{сам}}$ не зависят от Z^* , а следовательно, и от Z . Таким образом, корреляционная поправка к энергии одинакова для всех членов изоэлектронного ядра. Этот факт был установлен полуэмпирическим путем [84].

Далее, из независимости $E_{\text{кул}}$ от Z^* следует, что эта величина равна поправке на кулоновское взаимодействие двух электронов, находящихся только в поле ядра, т. е. имеющих волновую функцию нулевого приближения $\frac{1}{\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$. Эта поправка была вычислена Хилераасом [85] и оказалась равной

$$E_{\text{кул}} = -0,1574e^2/a_0. \quad (17.6)$$

17. 4. Прежде чем рассчитывать величину $E_{\text{сам}}$, приведем ряд важных соотношений.

Предположим, что нас интересует поправка второго порядка к энергии и первого порядка к волновой функции в задаче теории возмущений, где возмущающая функция $V(r)$ имеет радиальный характер:

$$[-\Delta/2M + V_0(r) + V(r) - E] \chi(\vec{r}) = 0.$$

Вводя $\chi(\vec{r}) = [1 + \kappa(r)] \chi_0(r)$, где χ_0 — решение невозмущенного уравнения с энергией E_0 ($\kappa \ll 1$), получим

$$\kappa'' + 2(\chi_0'/\chi_0 + 1/r)\kappa' = 2M[V(r) - \langle V \rangle],$$

где введен символ $\langle \dots \rangle \equiv \int d\vec{r} (\dots) \chi_0^2(r)$. В частности, из условий нормировки $\langle \kappa \rangle = 0$.

Полученное уравнение легко решается и дает

$$\left. \begin{aligned} \kappa(r) &= \int_0^r \Phi(\xi) D^{-1}(\xi) d\xi - \int_0^\infty dr D(r) \int_0^r \Phi(\xi) D^{-1}(\xi) d\xi, \\ E - E_0 &= -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr \Phi^2(r) D^{-1}(r), \end{aligned} \right\} \quad (17.7)$$

где

$$\Phi(r) = 2M \int_0^r d\xi D(\xi) [V(\xi) - \langle V \rangle]$$

и радиальная плотность $D(r) = 4\pi r^2 \chi_0(r)^2$.

Таким образом, если возмущающая функция имеет радиальный характер *, то волновая функция и энергия находятся с помощью несложных квадратур [83, 86].

Применим полученные соотношения к нахождению $E_{\text{сам}}$. Возмущением при этом будет служить величина

$$V(r) = B(r) = \frac{Z^* e^2}{a_0 \zeta} [1 - \exp(-2\zeta)(1 + \zeta)],$$

где $\zeta = \frac{Z^* r}{a_0}$. Функция Φ оказывается равной

$$\frac{Z^* e^2}{4a_0} \exp(-2\zeta) [10\zeta^2 - 6\zeta - 3 + \exp(-2\zeta)(8\zeta^2 + 12\zeta + 3)]$$

и

$$E_{\text{сам}} = -\frac{26 + 243 \ln\left(\frac{4}{3}\right)}{1728} e^2/a_0 = -0,0555e^2/a_0. \quad (17.8)$$

17. 5. Используя выражения (17. 3), (17. 6) и (17. 8), легко получить следующую оценку корреляционной энергии двухэлектронного атома:

$$E - E_0 = -0,046 e^2/a_0. \quad (17. 9)$$

Эта величина, не зависящая от Z , находится в удовлетворительном согласии с результатами сопоставления расчетных (в приближении Хартри) и опытных данных. Соответствующая разница меняется от $-0,042$ до $-0,054 e^2/a_0$ при изменении Z от 2 до 6 [87]. Остающееся расхождение объясняется частично неточностью водородоподобного приближения, частично ролью диаграмм высшего порядка.

Заслуживает специального обсуждения примечательный факт малости корреляционной поправки. Кинетическая энергия электронов \bar{T} (а также энергия в поле ядра \bar{U}) в двухэлектронном атоме в среднем порядка Z^2 , самосогласованная энергия взаимодействия $\sim Z$, корреляционная, как это установлено выше, вообще

* Фактически приведенные результаты применимы к основному состоянию системы, поскольку мы предположили, что $\chi_0^* = \chi_0$ и что χ_0 не зависит от углов.

не зависит от Z . Поэтому для атомов с большим Z указанный факт является вполне естественным и объясняется просто сжатостью системы. Гораздо более удивительно то обстоятельство, что малость корреляционной энергии имеет место и для гелия ($Z = 2$). В этом случае величина $\bar{T} + \bar{U}$ составляет $-4 e^2/a_0$, самосогласованная часть энергии около $+1 e^2/a_0$ (положительный знак этой величины связан с отталкиванием электронов), в то время как корреляционная энергия равна $-0,046 e^2/a_0$. Таким образом, при отсутствии каких-либо видимых малых параметров корреляционная и самосогласованная части энергии различаются почти на два порядка.

17. 6. Особенностью рассмотренного примера является то, что под действием сильного внешнего поля ядра система электронов оказалась сильно сжатой до таких размеров, что не только расстояние между частицами, но и общий размер системы оказались меньше радиуса дебаевского экранирования. Именно этот факт по существу и привел к возможности ограничиться рассмотрением лишь диаграммы низшего порядка.

Другим примером такого рода является многоэлектронный атом ($N \gg 1$), сжатый до соответствующих размеров внешними силами, или ион с $N \ll Z$, сжатый кулоновским полем ядра.

В первом случае, когда $N = Z \gg 1$, условие (16. 26) налагает следующие ограничения на радиус атома $r \sim dZ^{1/3}$:

$$r \ll a_0/Z^{1/3}, \quad (17. 10)$$

на плотность —

$$\rho \gg Z^2/a_0^3. \quad (17. 11)$$

Соответствующие давления отвечают, очевидно, областям II и III (см. § 6). Корреляционная энергия такого атома имеет величину порядка

$$E - E_0 \sim Z \ln Z e^2/a_0, \quad (17. 12)$$

не зависящую от плотности системы.

Однако в этом случае нельзя использовать для расчета корреляционного вклада в давление модель ячеек, так как ввиду $R_0 \gg r$ (r — радиус ячейки) в модели окажутся неучтенными корреляционные связи электронов данной ячейки с соседними. Поэтому сжатый изолированный акт в областях II, III отнюдь не имитирует сжатого реального вещества.

Другой пример отвечает сжатому иону. Условие (16. 26) дает

$$Z - N \gg N^{1/3}. \quad (17. 13)$$

Здесь принято во внимание то, что размер иона r порядка $\frac{a_0}{(Z - N)}$ ($Z - N$ — эффективный заряд ядра на периферии иона). Корреляционная энергия иона оказывается величиной порядка

$$E - E_0 \sim N \ln N \frac{e^2}{a_0}. \quad (17. 14)$$

Она не зависит от заряда ядра Z .

18. 1. В § 7, где ядерное вещество рассматривалось в приближении Хартри — Фока, отмечалось, что в рамках этого приближения нельзя получить устойчивого состояния ядра в области реальных значений плотности. Это связано по существу с недостаточно полным учетом сил отталкивания между нуклонами: фактически нуклоны, взаимодействующие как твердые шары, не могут сблизиться до расстояний, меньших диаметра этих шаров. Оказывается, что достаточно полный учет этого эффекта можно произвести в рамках теории возмущений, ограничиваясь малым числом соответствующих членов разложения.

Как уже указывалось в § 7, ядерное вещество с достаточной точностью можно описывать следующей моделью: нуклоны, имеющие измененный закон дисперсии за счет дальних сил притяжения, учтенных в приближении Хартри — Фока, связаны только силами отталкивания типа «твердой сердцевины». Обоснование этой модели с точки зрения потенциала взаимодействия (1. 11) будет дано в следующей главе.

Гамильтониан системы, отвечающий рассматриваемой модели, можно записать в виде

$$H = \int dq \psi^+(q) (T + W) \psi(q) + C + \frac{1}{2} \int dq dq' \psi^+(q) \psi^+(q') V_{(c)} \psi(q') \psi(q), \quad (18. 1)$$

где под $T + W$ нужно понимать выражение (7. 18) с заменой импульса \vec{p} на оператор \vec{p} и за вычетом последнего члена, входящего в соотношение (7. 20). Символически можно написать

$$T + W = \int_0^p \frac{dpp}{M_0(p)} - \frac{\pi}{12M(a-c)^2} [y^3 + 9 \text{Si } y - 9 \sin y], \quad (18. 2)$$

где M_0 дается соотношением (7. 19); $y = ap_0$. Второй член правой части выражения (18. 2) играет наряду с C роль потенциала внешнего поля; это общая потенциальная яма притяжения, в которой находятся нуклоны.

Потенциал $V_{(c)}$ можно заменить псевдопотенциалом, который, согласно выражениям (1. 17) — (1. 19) и (7. 16), представляется в виде суммы двух слагаемых. Первое, имеющее порядок c , приобретает вид

$$V_{\text{эфф}} = \frac{4\pi c}{M_{\text{эфф}}} \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r \right). \quad (18. 3)$$

Второе слагается из отвечающей p -рассеянию величины

$$\delta V_{\text{эфф}(1)} = - \frac{4\pi c^3}{M} \left[\sum_{\alpha} \nabla_{\alpha} \delta(\vec{r}) \nabla_{\alpha} + \delta(\vec{r}) \Delta \right] \quad (18. 4)$$

и члена порядка c^3 , ведущего свое происхождение от разложения (7. 16) в ряд по c :

$$\delta V_{\text{эфф}}(0) = -\frac{4\pi c^3}{3M} \delta(\vec{r}) \Delta. \quad (18. 5)$$

В последних двух выражениях мы заменили $M_{\text{эфф}}$ на M ввиду того, что $\frac{M}{M_{\text{эфф}}} = 1 + O(cp_0)$.

Переходя в рассматриваемой задаче к приближению Хартри — Фока, мы вернемся к результатам § 7. При этом псевдопотенциал (18. 3) из-за своего δ -образного характера не изменяет закона дисперсии нуклонов: его фурье-образ не зависит от \vec{p} . Поэтому величина $\frac{M}{M_0(p)}$ не меняется при переходе к приближению Хартри — Фока для потенциала $V_{(c)}$; изменение претерпевает лишь постоянное слагаемое оператора (18. 2).

18. 2. В § 7 мы не учитывали вклада псевдопотенциалов (18. 4) и (18. 5) (их следует учитывать лишь в приближении Хартри — Фока). Эти величины зависят от оператора импульса, поэтому нужно использовать общие соотношения (4. 30) и (4. 31). Остановимся подробнее на вычислении вклада потенциала (18. 4) в величину \mathbf{W} и энергию системы.

Подставляя в соотношения (4. 30) и (4. 31) выражения

$$f(\vec{x}, \vec{p}' + \vec{p}) = \theta[p_0^2(x) - (\vec{p}' + \vec{p})^2],$$

$$V[\vec{x} - \vec{x}', \pm \frac{1}{2}(i\vec{p}' + \nabla_{x'})] = -\frac{4\pi c^3}{M} \left[\pm \frac{i\vec{p}'}{2} \nabla \delta(\vec{r}) - \frac{1}{4} \delta(\vec{r}) p'^2 \right]$$

(дифференцирование функции f в квазиклассическом приближении излишне), находим после несложного интегрирования

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{4} \mathbf{B}, \quad \mathbf{W} = \frac{c^3}{2\pi M} \left(p_0^5 + \frac{5}{3} p_0^3 p^2 \right). \quad (18. 6)$$

В рассматриваемом примере не только \mathbf{A} , но и \mathbf{B} зависят от оператора импульса.

Соответствующий вклад в энергию нетрудно найти по общей формуле (4. 36)

$$\delta \mathcal{E} = 2 \int d^3 p \theta(p_0^2 - p^2) \mathbf{W}(p),$$

откуда

$$\delta \mathcal{E} = \frac{c^3 p_0^8}{(3\pi^3 M)}.$$

Представляя объем системы в виде $A/2Q = \frac{3\pi^2 A}{2\rho_0^3}$, где A — массовое число, имеем

$$\delta E = \frac{c^3 \rho_0^5 A}{2\pi M}. \quad (18.7)$$

Аналогично вычисляется и вклад потенциала (18.5).

18.3. Подставим псевдопотенциал (18.3) в гамильтониан взаимодействия (18.1). Соответствующая величина параметра $\rho_0 l$ (см. раздел 16.8) равна $\rho_0 c < 1$. Поэтому можно ограничиться учетом диаграмм рис. 26 низшего порядка.

Рассмотрим диаграммы второго порядка. Соответствующее выражение для энергии дается соотношением (15.22). Однако требуется некоторая осторожность при подстановке в эту формулу фурье-образа потенциала $v(k)$.

Покажем, что в выражении (15.22) можно положить $v(k) = \frac{4\pi c}{M_{\text{эфф}}} \left(\text{как было бы при отсутствии оператора } 1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r \right)$, одновременно заменяя комбинацию $\left(1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}}\right) \left(1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}}\right)$ на $\left(1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}}\right) \left(1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}}\right) - 1$. Сходную замену следует делать и в высших порядках теории возмущений.

Действительно, указанный оператор при действии на регулярную в точке $r = 0$ функцию сводится к единице (имеется в виду дальнейшее умножение на δ -функцию), а при действии на выражение $P \int \frac{d^3 p \sin pr}{pr \Delta \epsilon(\vec{p})}$ обращает его в нуль. В интеграл (15.18) входит произведение двух функций v . Подстановка в одну из них псевдопотенциала (7.16) требует учета оператора $1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r$; что же касается другой, то там псевдопотенциал действует уже на регулярную функцию — на правую обкладку матричного элемента. Поэтому мы можем сразу положить в одном из сомножителей $v = 4\pi c / M_{\text{эфф}}$. Это даст

$$E - E_0 = \dots \left(\frac{4\pi c}{M_{\text{эфф}}} \right)^2 3 (2\pi)^3 \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 k \times \\ \times \frac{n_{\vec{p}_1} n_{\vec{p}_2} (1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}}) (1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}})}{\epsilon_{\vec{p}_1 + \vec{k}} + \epsilon_{\vec{p}_2 - \vec{k}} - \epsilon_{\vec{p}_1} - \epsilon_{\vec{p}_2}} \int d\vec{r} \delta(\vec{r}) \left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r \right) \times \\ \times \exp(-i\vec{k}\vec{r}).$$

Ввиду того что состояния $\vec{p}_{1,2}$ лежат ниже, а $\vec{p}_1 + \vec{k}$ и $\vec{p}_2 - \vec{k}$ выше сферы Ферми, интеграл по \vec{k} можно фактически понимать

в смысле главного значения. Поэтому в $E - E_0$ фигурирует интеграл

$$P \int d^3k \exp(i\vec{k}r) \frac{(1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}})(1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}})}{\Delta_\varepsilon(\vec{k})},$$

на который действует псевдопотенциал. Этот интеграл при замене $(1 - n)(1 - n)$ на 1 дает нулевой вклад. Поэтому, делая замену $(1 - n)(1 - n) \rightarrow (1 - n)(1 - n) - 1$, мы не меняем результата. Однако интеграл по \vec{k} становится регулярной функцией r в точке $r = 0$, поскольку в области больших \vec{k} подынтегральное выражение теперь равно нулю. Это позволяет отбросить оператор $1 + r \frac{\partial}{\partial r} + \beta r$ и прийти к окончательному выражению

$$E - E_0 = -3(2\pi)^3 \left(\frac{4\pi c}{M_{\text{эфф}}} \right)^2 \int d^3p_1 d^3p_2 d^3k \times \\ \times \frac{n_{p_1} n_{p_2} [(1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}})(1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}}) - 1]}{\varepsilon_{\vec{p}_1 + \vec{k}} + \varepsilon_{\vec{p}_2 - \vec{k}} - \varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2}}. \quad (18.8)$$

Вычисление этого интеграла представляет собой нелегкую задачу, которую следует упростить. Фактически интегрирование здесь совершается в сравнительно узкой области около границы Ферми. Поэтому величина интеграла изменится лишь незначительно, если заменить $\varepsilon_{\vec{p}}$ на $p^2/2M_0$, где M_0 отнесено к границе Ферми. Используя результаты § 7, получим ($y = ap_0$):

$$\frac{M}{M_0} = 1 + \frac{3}{2\pi} \frac{V_0 M a^2}{y} \left(1 + \frac{\sin 2y}{2y} - \frac{2 \sin^2 y}{y^2} \right).$$

Подставляя это выражение в соотношение (18.8), получим

$$E - E_0 = -\frac{3}{4\pi^4} \cdot \frac{c^2}{M} \left(\frac{M}{M_{\text{эфф}}} \right)^2 \frac{M_0}{M} I, \quad (18.9)$$

где

$$I = \int d^3p_1 d^3p_2 d^3k \frac{[(1 - n_{\vec{p}_1 + \vec{k}})(1 - n_{\vec{p}_2 - \vec{k}}) - 1] n_{p_1}^{\vec{p}_1} n_{p_2}^{\vec{p}_2}}{(\vec{p}_1 + \vec{k})^2 + (\vec{p}_2 - \vec{k})^2 - p_1^2 - p_2^2}.$$

Вычисление I подробно описано в работе [37]. Окончательное выражение для корреляционной поправки низшего порядка имеет вид

$$E - E_0 = \frac{6(11 - 2 \ln 2) c^2 p_0^4}{35\pi^2 M} \left(\frac{M}{M_{\text{эфф}}} \right)^2 \left(\frac{M_0}{M} \right) A. \quad (18.10)$$

18.4. Корреляционную поправку третьего порядка по параметру cp_0 вычислять не будем. В литературе имеются данные [31], касающиеся суммарной величины этой поправки и вклада псевдо-

потенциала (18. 5) в случае квадратичного закона дисперсии. Соответствующая величина имеет вид

$$E - E_0 = \frac{0,13c^3\rho_0^5}{M} A. \quad (18. 11)$$

Учет неквадратичности закона дисперсии сказался бы на появлении дополнительного фактора $(M/M_{\text{эфф}})^3 (M_0/M)^2$, связанного с наличием в выражении для поправки третьего порядка двух энергетических знаменателей и трех псевдопотенциалов. Этот фактор, однако, близок к единице, и мы можем оставить выражение (18. 11).

Таким образом, полная энергия ядерной материи с учетом корреляций за счет сил отталкивания может быть записана в виде

$$E = E_0 + \frac{6(11 - 2 \ln 2) c^2 \rho_0^4}{35\pi^2 M} \left(\frac{M}{M_{\text{эфф}}} \right)^2 \frac{M_0}{M} A + \\ + \frac{0,13c^3\rho_0^5}{M} A + \frac{c^3\rho_0^5}{2\pi M} A, \quad (18. 12)$$

где E_0 дается выражением (7. 22).

Величина E в отличие от E_0 уже имеет минимум при разумных значениях ρ_0 . Это связано с быстрым ростом корреляционных членов при $\rho_0 \rightarrow \infty$. Приведем окончательный результат для равновесных значений ρ_0 и E [38].

$$\left. \begin{aligned} \rho_0 &\approx 1,4 \text{ ферми}^{-1}, \\ E/A &\approx -11 \text{ Мэв}. \end{aligned} \right\} \quad (18. 13)$$

Отдельные слагаемые энергии имеют следующую величину: кинетическая энергия — 25 Мэв, энергия притяжения — 68 Мэв, энергия отталкивания — 32 Мэв. При этом последняя величина складывается из четырех чисел, равных соответственно 21; 6; 2,5 и 2,5 Мэв. Первые три отвечают самосогласованной части и двум первым корреляционным поправкам, описывающим s -рассеяние. Видно, что соответствующий ряд сходится достаточно быстро. Последний член описывает вклад p -рассеяния.

Сравнение данных (18. 13) с эмпирическими данными свидетельствует об удовлетворительном согласии. Величина ρ_0 оказывается правильной, а E/A близко к коэффициенту C_1 в формуле Вейцеккера (см. § 7), равному —15 Мэв.

18. 5. Для получения величины остальных коэффициентов формулы Вейцеккера необходимо в дополнение к выражениям § 7 принять во внимание корреляционные члены, вычисленные с учетом неравенства числа протонов и нейтронов, а также с учетом конечности ядра. Неравенство числа протонов и нейтронов учитывается введением в соответствующие формулы разных граничных импульсов: $\rho_0(p) \neq \rho_0(n)$. Неоднородность в распределении частиц можно принять во внимание, относя все величины в поверхностном слое к значению ρ_0 , вдвое меньшему, чем в сердцевине ядра.

Подробности соответствующих расчетов приведены в работе [72]. Оказывается, что корреляционные эффекты наиболее сильно сказываются (помимо объемной части энергии) на поверхностной части энергии, заметно уменьшая ее величину. Остальные величины меняются незначительно (табл. 2).

Таблица 2

Сравнение расчетных и эмпирических характеристик атомного ядра

Характеристика атомного ядра	Расчетная величина	Эмпирическая величина
Радиус ядра $R/A^{1/3}$	1,1 ферми	1,1 ферми
Ширина поверхностного слоя d	3 ферми	2,4 ферми
Объемная энергия C_1	-11 Мэв	-15 Мэв
Кулоновская энергия C_2	0,7 Мэв	0,7 Мэв
Энергия симметрии C_3	33* Мэв	24 Мэв
Поверхностная энергия C_4	23 Мэв	18 Мэв

Таким образом, налицо более или менее хорошее согласие с опытом*. Этот факт свидетельствует о том, что трехчастичные силы в атомном ядре в общем играют, по-видимому, меньшую роль, чем можно было бы заключить из общих соображений (см. § 1).

* По поводу расхождения в величине C_3 нужно заметить следующее. В описанном расчете полностью пренебрегалось интерференцией поверхностных эффектов и эффектов симметрии. В то же время в современном варианте полуэмпирической формулы Вейцеккера [74], где эта интерференция принята во внимание, получаются значения $C_3 \approx 30$ Мэв, $C_4 \approx 21$ Мэв, находящиеся в близком согласии с полученными в расчете. Поэтому окончательные выводы можно будет сделать лишь после проведения расчета указанной интерференции.

ГЛАВА IV

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

§ 19. ОДНОЧАСТИЧНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

19. 1. В настоящей главе проведено рассмотрение задачи многих частиц, в основе которого не лежит разложение в ряд теории возмущений.

Необходимость выхода за рамки теории возмущений диктуется прежде всего желанием описать системы, в которых взаимодействие между частицами не может считаться слабым. Решение соответствующих «точных» полевых уравнений столь же трудно, как и решение точного уравнения Шредингера. Наибольший интерес, однако, представляет подробно рассмотренная в § 16 ситуация, когда основную роль играет некоторая выделенная бесконечная подсовокупность членов ряда теории возмущений. Полевые методы позволяют суммировать члены этой совокупности простым и компактным способом.

Важнейшая задача теории многих частиц, связанная с нахождением спектра возбужденных состояний системы, также требует выхода за рамки теории возмущений. Эта задача не может быть даже поставлена в полном объеме, если ограничиться рассмотрением ряда теории возмущений. При разложении соответствующих величин в ряд теории возмущений дополнительные ветви спектра возбуждений, обусловленные взаимодействием между частицами, полностью исчезают.

Важнейшим элементом проводимого ниже рассмотрения являются так называемые функции Грина; простейшая из них представляет собой непосредственное обобщение свертки операторов. В функциях Грина сосредоточена многосторонняя физическая информация. Располагая выражениями для одночастичной и парной функций Грина, можно ответить практически на все вопросы, связанные с описанием системы частиц.

Рассмотренные в § 15 аспекты описания, относящиеся к распределению одночастичных характеристик системы (матрица плотности) и энергии системы, могут быть получены из собственно энергетической части S -матрицы Σ . Эта величина непосредственно связана с одночастичной функцией Грина.

Имея в своем распоряжении двухчастичную функцию Грина, можно получить и более детальные двухчастичные характеристики системы, к которой относятся корреляционные характеристики системы, ее кинетические коэффициенты, описывающие реакцию системы на внешние возмущения, и многое другое.

Наконец, функции Грина дают возможность подойти к решению задачи о спектре возбуждений системы. Характеристики элементарных возбуждений (квазичастиц) можно получать из функ-



Рис. 30

ций Грина путем сравнительно несложных математических манипуляций.

19.2. В предыдущей главе многократно использовалась свертка операторов

$$\widehat{\Psi(1)\Psi^+(2)} = \langle \psi_0 | T [\Psi(1)\Psi^+(2)] | \psi_0 \rangle = iG_0(1, 2),$$

представляющая собой важную составную часть диаграммной техники. Свертка операторов описывает распространение частицы, не коррелированной с другими частицами системы.

Для выхода за рамки теории возмущений необходимо обобщить понятие свертки операторов, рассматривая распространение ча-

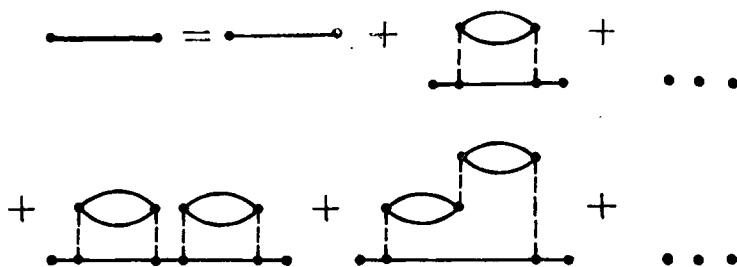


Рис. 31

стицы с учетом всевозможных ее корреляционных взаимодействий с остальными частицами системы. Эти корреляции сводятся к тому, что частица всеми возможными способами возбуждает систему, т. е. приводит к переходу того или иного числа частиц через границу Ферми, а затем это возбуждение снимается.

На графическом языке рассматриваемая функция распространения должна объединять все диаграммы, соединяющие две заданные точки. Изображая обобщенную функцию распространения жирной линией, можно написать диаграммное равенство (рис. 30), означающее, что распространение частицы с учетом взаимодействия сводится к распространению свободной частицы плюс распространение частицы со всевозможными собственно энергетическими вставками. На рис. 31 изображены некоторые

диаграммы, из которых складывается обобщенная функция распространения.

Простую функцию распространения мы обозначали через $iG_0(1, 2)$, где G_0 — свободная функция Грина. Аналогично обобщенную функцию распространения мы обозначим через $iG(1, 2)$, где G — точная одночастичная функция Грина. Используя правила Фейнмана и опуская множитель i , диаграммное равенство рис. 30 можно записать в виде

$$G(1, 2) = G_0(1, 2) + \int d3 d4 G_0(1, 3) \Sigma(3, 4) G_0(4, 2). \quad (19. 1)$$

Покажем, что функцию Грина G можно записать в виде среднего значения

$$G(1, 2) = -i \frac{\langle \Psi_0 | T [\Psi_B(1) \Psi_B^+(2) S] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}, \quad (19. 2)$$

где T — произведение операторов, включающих S -матрицу, следует понимать в смысле

$$S(\infty, t_1) \Psi_B(1) S(t_1, t_2) \Psi_B^+(2) S(t_2, -\infty)$$

при $t_1 > t_2$ и аналогично в обратном случае.

Для доказательства достаточно подставить в выражение (19. 2) разложение S -матрицы (14. 1). Отличный от нуля вклад дадут лишь первые два члена этого разложения. Рассмотрение, полностью аналогичное проведенному в разделе 15. 2, немедленно приводит нас к равенству (19. 1), а соотношение (15. 5) позволяет выразить функцию Грина через операторы в представлении Гейзенберга:

$$G(1, 2) = -i \langle \Psi | T [\Psi_G(1) \Psi_G^+(2)] | \Psi \rangle. \quad (19. 3)$$

Это соотношение отличается от выражения (19. 2) более простой структурой, и потому удобно для исследований общего характера. Однако в него входят гейзенберговские операторы и волновые функции, требующие для своего нахождения решения задачи о взаимодействии.

19. 3. Соотношение (19. 1), связывающее функцию Грина с собственно энергетической частью Σ , может быть заменено более удобным соотношением, называемым уравнением Дайсона.

Предварительно проведем анализ собственно энергетической части Σ с точки зрения тех диаграмм, из которых она состоит. Как видно из рис. 21, наряду с так называемыми компактными диаграммами, которые нельзя расщепить линией, пересекающей только одну линию диаграммы (см. рис. 21, б, в, г), в Σ входят также некомпактные диаграммы, не обладающие этим свойством, (см. рис. 21, д). Оказывается возможным свести Σ к сумме лишь компактных диаграмм, которая обозначается через $M(1, 2)$ и носит название массового оператора. Его графическое изображение приведено на рис. 32.

Для нахождения связи между величинами Σ и M достаточно провести следующее несложное рассуждение. Сумма всех диаграмм (компактных и некомпактных), образующих Σ , может быть получена, если взять сначала сумму компактных диаграмм, затем сумму некомпактных, образованных из пары компактных, затем сумму некомпактных — из трех компактных и т. п. (рис. 33).

При использовании правил Фейнмана для получения соответствующего аналитического соотношения нужно учитывать, что

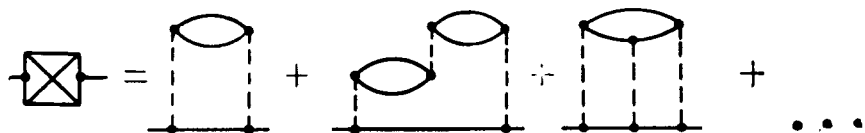


Рис. 32

в отличие от вакуумных переходов (см. § 14) здесь не появляется никаких дополнительных численных множителей. Это связано с наличием выделенного направления распространения, что делает невозможной дополнительную замену переменных, сохраняющую вид рассматриваемого элемента. Поэтому мы получаем простое соотношение

$$\Sigma(1, 2) = M(1, 2) + \int d^3 d^4 M(1, 3) G_0(3, 4) M(4, 2) + \\ + \int d^3 d^4 d^5 d^6 M(1, 3) G_0(3, 4) M(4, 5) G_0(5, 6) M(6, 2) + \dots \quad (19. 4)$$



Рис. 33

Этот бесконечный ряд можно считать решением следующего интегрального уравнения:

$$\Sigma(1, 2) = M(1, 2) + \int d^3 d^4 M(1, 3) G_0(3, 4) \Sigma(4, 2). \quad (19. 5)$$

В самом деле, последовательно итерируя это уравнение, т. е. подставляя в правую часть вместо Σ сначала M , затем получившееся исправленное выражение для Σ и т. д., мы вернемся к выражению (19. 4). Это интегральное уравнение изображено графически на рис. 34.

Рассмотрим далее комбинацию

$$\int d^3 \Sigma(1, 3) G_0(3, 2) = \\ = \int d^3 M(1, 3) [G_0(3, 2) + \int d^4 d^5 G_0(3, 4) \Sigma(4, 5) G_0(5, 2)]. \quad (19. 6)$$

Согласно выражению (19. 1) в правую часть можно ввести функцию Грина G , что даст (рис. 35)

$$\int d^3 \Sigma(1, 3) G_0(3, 2) = \int d^3 M(1, 3) G(3, 2). \quad (19. 6')$$

Благодаря этой связи можно перейти от выражения (19. 1) к интегральному уравнению Дайсона (рис. 36):

$$G(1, 2) = G_0(1, 2) + \int d^3 d^4 G_0(1, 3) M(3, 4) G(4, 2). \quad (19. 7)$$

Если подействовать на уравнение Дайсона слева оператором $i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W$, то с учетом соотношения (10. 6) получим уравнение

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) G(1, 2) = \int d^3 M(1, 3) G(3, 2) = \delta(1-2). \quad (19. 8)$$

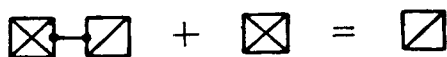


Рис. 34

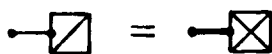


Рис. 35

Таким образом, и точная функция Грина является функцией Грина некоторого уравнения, которое описывает распространение частицы. В приближении Хартри — Фока это уравнение совпадало просто с индивидуальным уравнением Шредингера частицы. В рассматриваемом же случае сюда добавляется еще массовый оператор, который описывает изменение характера движения частицы под действием корреляционного взаимодействия.

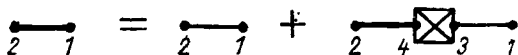


Рис. 36

19. 4. Перейдем теперь к энергетическому представлению, записывая функцию Грина в виде

$$G(1, 2) = \sum_{\mu\nu} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \exp[-i\varepsilon(t_1 - t_2)] \chi_\mu^*(q_2) \chi_\nu(q_1) G_{\mu\nu}(\varepsilon). \quad (19. 9)$$

Вводя аналогичное представление и для массового оператора, можно переписать уравнение (19. 8) в виде

$$(\varepsilon - \varepsilon_\nu) G_{\mu\nu}(\varepsilon) - \sum_\sigma M_{\mu\sigma}(\varepsilon) G_{\sigma\nu}(\varepsilon) = \delta_{\mu\nu}. \quad (19. 10)$$

Еще проще выглядят полученные соотношения для пространственно-однородной системы. Полагая

$$G(1, 2) = \int d^4 p G(\vec{p}, \varepsilon) \exp[i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) - i\varepsilon(t_1 - t_2)] \quad (19. 11)$$

и используя аналогичное представление для M , вместо выражения (19. 7) получим

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = G_0(\vec{p}, \varepsilon) [1 + M(\vec{p}, \varepsilon) G(\vec{p}, \varepsilon)]$$

или, применяя выражение (10. 8) для $G_0(\vec{p}, \varepsilon)$,

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \left[\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}} - M(\vec{p}, \varepsilon) \right]^{-1}. \quad (19. 12)$$

Правила обхода соответствующих особенностей $G(\vec{p}, \varepsilon)$ будут рассмотрены в § 23.

Учет взаимодействия между частицами в приближении Хартри — Фока привел к изменению их закона дисперсии (величина $p^2/2M$ заменилась на $\varepsilon_{\vec{p}}$). Учет корреляционного взаимодействия приводит, как показывает выражение (19. 12), к дальнейшим изменениям в этом направлении. Фактически последние изменения носят более глубокий характер.

19. 5. Через функцию Грина можно выразить рассмотренные в § 15 физические величины — матрицу плотности и энергию основного состояния системы.

Начнем с одночастичной матрицы плотности. Как следует из выражения (15. 3), эта величина непосредственно связана с функцией Грина:

$$R(q_1, q_2) = -i \lim_{t_2 - t_1 \rightarrow +0} G(1, 2). \quad (19. 13)$$

Учитывая, что G зависит только от комбинации $t_1 - t_2$, а не от времен t_1 и t_2 порознь, и разлагая G в интеграл Фурье по этой разности

$$G(1, 2) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \exp[-i\varepsilon(t_1 - t_2)] G(q_1, q_2, \varepsilon),$$

имеем аналогично результатам § 15

$$R(q_1, q_2) = -i \int_C \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(q_1, q_2, \varepsilon) \quad (19. 14)$$

(контур C изображен на рис. 24).

Теперь нетрудно найти выражение для точной функции распределения $f(\vec{x}, \vec{p})$, разлагая $G(q_1, q_2, \varepsilon)$ в интеграл Фурье по разности $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$

$$G(q_1, q_2, \varepsilon) = \int d^3 p G(\vec{x}_1, \vec{p}, \varepsilon) \exp[i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)].$$

Отсюда

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = -i \int_C \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\vec{x}, \vec{p}, \varepsilon). \quad (19. 15)$$

Для пространственно-однородной системы $G(\vec{x}, \vec{p}, \varepsilon)$ не зависит от \vec{x} и является просто фурье-образом $G(\vec{x}_1 - \vec{x}_2, \varepsilon)$ по разности $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$. При этом величина

$$\varrho(\vec{p}) = -i \int_C \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\vec{p}, \varepsilon) \quad (19. 16)$$

дает распределение частиц по импульсам.

Перейдем теперь к выражению для энергии системы. Из результатов, полученных в разделе 15. 4, следует

$$E = -\frac{i}{2} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + T \right) G(1, 2). \quad (19. 17)$$

Для пространственно-однородной системы

$$E = -\frac{i\Omega}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int_C d^4 p (\varepsilon + p^2/2M) G(\vec{p}, \varepsilon). \quad (19. 18)$$

Используя уравнение (19. 8), можно также написать

$$E = -i \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow 0}} \left\{ \left(T + \frac{W}{2} \right) G(1, 2) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \int d^3 M(1, 3) G(3, 2) \right\}. \quad (19. 19)$$

Для пространственно-однородной системы имеем

$$E = -\frac{i\Omega}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int_C d^4 p \left[\varepsilon_{\vec{p}} + p^2/2M + M(\vec{p}, \varepsilon) \right] G(\vec{p}, \varepsilon). \quad (19. 20)$$

Это выражение отличается от приведенного, например, в работе [88] лишь по форме: фигурирующий здесь массовый оператор не включает в себя самосогласованной части, равной $\varepsilon_{\vec{p}} - p^2/2M$.

Другая форма выражения для энергии может быть получена, если ввести параметр λ (см. § 15). Приведем выражение для корреляционной энергии:

$$E - E_0 = \frac{i}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 - t_1 \rightarrow +0}} \times \\ \times \left\{ \int d^3 M(1, 3) G(3, 2) - \lambda W_{q_1} [G(1, 2) - G_0(1, 2)] \right\}. \quad (19. 21)$$

Для пространственно-однородной системы

$$E - E_0 = \frac{i\Omega}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_C d^4 p \times \\ \times \left[1 - \lambda (\varepsilon_{\vec{p}} - p^2/2M) G_0(\vec{p}, \varepsilon) \right] M(\vec{p}, \varepsilon) G(\vec{p}, \varepsilon). \quad (19. 22)$$

§ 20. ПАРНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

20. 1. Наряду с одночастичной функцией Грина, описывающей распространение одной частицы с учетом ее корреляционных связей с системой, можно ввести понятие о функциях Грина выс-

шего порядка. Важнейшей из них является парная (или двух-частичная) функция Грина, определяемая соотношением

$$G(1, 2, 1', 2') = (-i)^2 \frac{\langle \Psi_0 | T [\Psi_B(1) \Psi_B(2) \Psi_B^\dagger(2') \Psi_B^\dagger(1')] S | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}. \quad (20.1)$$

Переходя к представлению Гейзенберга, можно написать

$$G(1, 2, 1', 2') = (-i)^2 \langle \Psi | T [\Psi_r(1) \Psi_r(2) \Psi_r^\dagger(2') \Psi_r^\dagger(1')] | \Psi \rangle. \quad (20.2)$$

Парная функция Грина описывает распространение двух частиц (двух дырок или частицы и дырки) с учетом их корреляционного взаимодействия друг с другом и с остальными частями системы. Функция Грина, записанная в форме (20.2), опи-

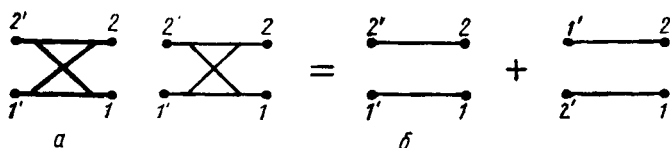


Рис. 37

сывает распространение двух частиц из точек $1', 2'$ в точки $1, 2$. Если переписать выражение (20.2) в форме

$$G(1, 2, 1', 2') = \langle \Psi | T [\Psi_r(1) \Psi_r^\dagger(2') \Psi_r(2) \Psi_r^\dagger(1')] | \Psi \rangle, \quad (20.2')$$

то видно, что одновременно описывается распространение частицы и дырки из точек $1', 2$ в точки $1, 2'$. Аналогичным образом можно убедиться в том, что парная функция Грина содержит также распространение двух дырок (из $1, 2$ в $1', 2'$). Графический образ парной функции Грина представлен на рис. 37, а.

Парная функция Грина обладает следующими свойствами симметрии:

$$G(1, 2, 1', 2') = -G(2, 1, 1', 2') = -G(1, 2, 2', 1').$$

В приближении Хартри—Фока ($S = 1$) парная функция Грина распадается на антисимметризованное произведение одно-частичных функций. Применяя к выражению (20.1) теорему Вика, находим

$$G_0(1, 2, 1', 2') = G_0(1, 1') G_0(2, 2') - G_0(1, 2') G_0(2, 1'). \quad (20.3)$$

В этом случае мы имеем дело с некоррелированным распространением двух частиц, включающим лишь обменные корреляции (см. рис. 37, б). Двумя более тонкими линиями с крестом обозначена функция $G_0(1, 2, 1', 2')$.

20. 2. Подставим в выражение (20. 1) разложение S -матрицы (14. 1). Первый член этого разложения дает просто парную функцию в приближении Хартри—Фока $G_0(1, 2, 1', 2')$. Второй член разложения после применения теорем Вика приводит к выражению

$$\int d3 d4 \Sigma(3, 4) \{G_0(1, 3)G_0(2, 4, 2', 1') + G_0(2, 3)G_0(1, 4, 1', 2')\}. \quad (20. 4)$$

Наконец, из третьего члена разложения, содержащего вершинную часть, находим

$$\int d3 d4 d5 d6 G_0(1, 2, 3, 4) \Gamma(3, 4, 5, 6) G_0(5, 6, 1', 2'). \quad (20. 5)$$

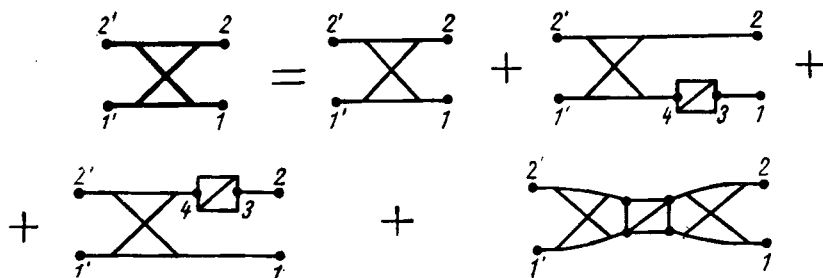


Рис. 38

Остальные члены разложения (14. 1) не вносят вклада в рассматриваемое выражение. Графически полученное равенство представлено на рис. 38. Первый его член описывает распространение некоррелированных частиц, второй и третий — корреляцию частиц с системой (но не друг с другом) и последний — корреляцию частиц друг с другом (а также, как мы увидим, и с системой).

Дальнейшее рассмотрение будет связано с выявлением некоторых особенностей структуры вершинной части, которая представляет собой сумму всевозможных диаграмм, имеющих четыре свободных конца. Среди них обязательно найдутся диаграммы несвязного характера, которые можно расщепить линией, не пересекающей ни одной из линий диаграммы (рис. 39, а). Сумма несвязных диаграмм может быть выражена через собственно-энергетическую часть Σ (см. рис. 39, б)*:

$$\Gamma_{\text{несв}}(1, 2, 3, 4) = \frac{1}{2} \Sigma(1, 3) \Sigma(2, 4). \quad (20. 6)$$

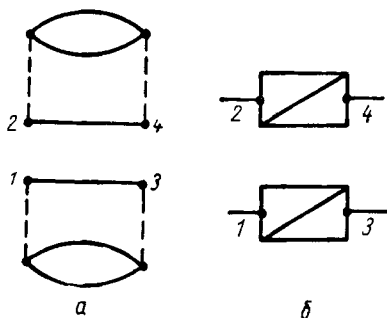


Рис. 39

* Выражение для $\Gamma_{\text{несв}}$ приведено в неантисимметризованной форме.

Коэффициент $1/2$ связан с возможностью замены переменных обеих несвязных частей.

Подставляя $\Gamma_{\text{несв}}$ в выражение (20. 5) и складывая полученное выражение с соотношениями (20. 4) и (20. 3), нетрудно убедиться с помощью уравнения (19. 1) в том,



Рис. 40

что мы получаем выражение (20. 3), в котором нужно заменить свободные одночастичные функции Грина G_0 точными G , т. е. должна произойти замена свободной парной функции Грина величиной (рис. 40, а)

$$\tilde{G}(1, 2, 1', 2') = G(1, 1') G(2, 2') - G(1, 2') G(2, 1'). \quad (20. 7)$$

Таким образом, полученное уравнение для парной функции Грина можно записать в виде

$$G(1, 2, 1', 2') = \tilde{G}(1, 2, 1', 2') + \int d3 d4 d5 d6 G_0(1, 2, 3, 4) \Gamma_{\text{св}}(3, 4, 5, 6) G_0(5, 6, 1', 2'). \quad (20. 8)$$



Рис. 41

Здесь первые два члена описывают независимое друг от друга (но коррелированное с системой) движение пары частиц; последний член учитывает также их взаимные корреляционные связи ($\Gamma_{\text{св}}$ — связанная вершинная часть, см. рис. 40, б). Графически уравнение (20. 8) изображено на рис. 41.

20. 3. Уравнение (20. 8) в известном смысле аналогично уравнению (19. 1) для одночастичной функции Грина. Оба уравнения связывают точную функцию Грина со свободной, причем свободную функцию в уравнении (20. 8) оказывается возможным заменить функцией \tilde{G} , если провести дальнейшее преобразование вершинной части.

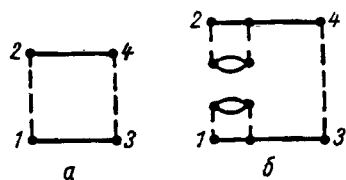


Рис. 42

С этой целью обратим внимание на то, что связанная вершинная часть $\Gamma_{\text{св}}(1, 2, 3, 4)$ может состоять из диаграмм двух типов. К первому типу относятся диаграммы, в которых каждая из выходных точек 1, 2, 3, 4 соединена с какой-либо другой выходной точкой (рис. 42, а).

К вершинным частям диаграмм второго типа относятся диаграммы, в которых хотя бы одна из выходных точек не соединена с какой-либо из остальных выходных точек (см. рис. 42, б). Обозначая сумму всех диаграмм первого типа через Δ (рис. 43, а), можно написать диаграммное равенство, связывающее $\Gamma_{\text{св}}$ и Δ

178

(см. рис. 43, б). Здесь точки отвечают аналогичным графикам, содержащим всевозможные перестановки вершин. Соответствующее аналитическое равенство, легко получаемое из правил Фейнмана, мы не приводим ввиду его громоздкости.

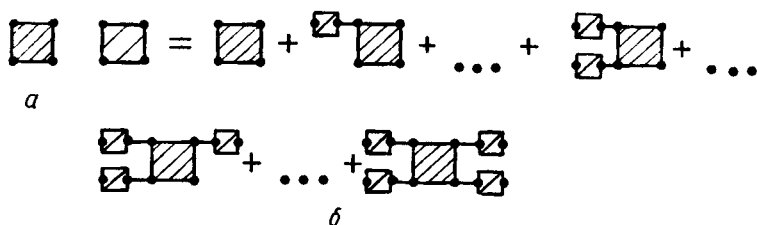


Рис. 43

Можно без труда показать, что сочетание входящих в уравнение (20. 8) свободных парных функций Грина с собственно энергетическими частями (см. рис. 43, б) приводит к замене в этом уравнении функций типа $G_0(1, 2, 3, 4)$ на $\tilde{G}(1, 2, 3, 4)$. Для этого в последнее выражение надо подставить соотношение (19. 1) и построить соответствующие графики. Таким образом, можно написать (рис. 44, а)

$$G(1, 2, 1', 2') = \tilde{G}(1, 2, 1', 2') + \int d3 d4 d5 d6 \tilde{G}(1, 2, 3, 4) \times \Delta(3, 4, 5, 6) \tilde{G}(5, 6, 1', 2'). \quad (20. 9)$$

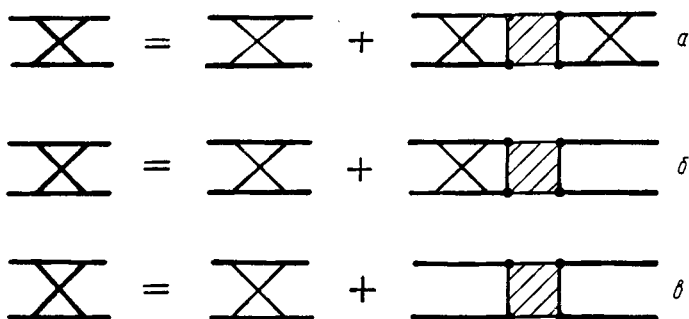


Рис. 44

Это выражение можно несколько упростить, если учесть следующее свойство симметрии всех вводимых функций вершинной части (см. раздел 14. 5):

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) = -\Gamma(2, 1, 3, 4) = -\Gamma(1, 2, 4, 3). \quad (20. 10)$$

Таким образом (см. рис. 44, б):

$$G(1, 2, 1', 2') = \tilde{G}(1, 2, 1', 2') + \int d3 d4 d5 d6 G(1, 3) G(2, 4) \Delta(3, 4, 5, 6) \tilde{G}(5, 6, 1', 2'). \quad (20. 11)$$

Аналогичную процедуру можно проделать и с правой функцией Грина, что дает (см. рис. 44, в)

$$G(1, 2, 1', 2') = \tilde{G}(1, 2, 1', 2') + 4 \int d3 d4 d5 d6 G(1, 3) \times \\ \times G(2, 4) \Delta(3, 4, 5, 6) G(5, 1') G(6, 2'). \quad (20.12)$$

Среди диаграмм вершинной части Δ имеются так называемые некомпактные диаграммы, которые можно рассесть линией, пересекающей лишь две сплошных линии диаграммы. В принципе можно было бы путем замены ядра Δ в предыдущем уравнении на компактное ядро привести уравнение к интегральному, являющемуся аналогом уравнения Дайсона для одночастичной функции Грина

$$G(1, 2, 1', 2') = G'(1, 2, 1', 2') + \int d3 d4 d5 d6 \times \\ \times K(1, 2, 1', 2'; 3, 4, 5, 6) G(3, 4, 5, 6), \quad (20.13)$$

где ядро K может быть выражено через компактную часть Δ , а G' через функцию Грина $G(1, 2)$ и т. д. Однако установить эту связь — нелегкая задача.

Уравнение (20.12), связывающее парную функцию Грина с вершинной частью Δ , играет важную роль в полуфеноменологической теории ферми-жидкости Ландау [89]. Сама величина Δ оказывается тесно связанной с процессом рассеяния квазичастиц друг на друге и при определенных условиях совпадает с соответствующей амплитудой рассеяния.

20.4. Существуют соотношения, связывающие между собой одночастичную и парную функции Грина. К выводу одного из них мы переходим.

Поддействуем оператором $i \frac{\partial}{\partial t_1} - T_{q_1}$ на выражение для функции Грина (19.3). Используя уравнение движения для оператора поля в представлении Гейзенберга (3.28), соотношение (9.12') и правила коммутации операторов при совпадающих временах (3.27), получим

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T \right) G(1, 2) = \delta(1 - 2) - \\ - i \int d3 \langle \Psi | T [\Psi_r^+(3) V(1, 3) \Psi_r(3) \Psi_r(1) \Psi_r^+(2)] | \Psi \rangle. \quad (20.14)$$

Приведем среднее значение операторов к виду парной функции Грина. Так как времена t_1 и t_3 совпадают, соответствующие операторы под знаком T -произведения менять нельзя. В § 9 возможность такого обмена мотивировалась тем, что упорядочение по времени все равно расставит операторы в нужном порядке. Ясно, что если эти операторы отнесены к совпадающим временам, то сказанное теряет свою силу.

Для приведения четырехчастичного среднего значения к виду парной функции Грина нам придется временно ввести у первых

трех операторов этого среднего значения неравные времена. Тогда можно записать

$$\langle \Psi | T [\Psi_r^+ (3) \Psi_r (3) \Psi_r (1) \Psi_r^+ (2)] | \Psi \rangle = \lim_{\substack{4 \rightarrow 3 \\ t_4 > t_3 > t_1, t_4 \rightarrow t_1}} G (3, 1, 4, 2). \quad (20. 15)$$

При этом операторы действительно приобретают нужный порядок. Таким образом, искомое уравнение можно записать в виде

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T \right) G (1, 2) + i \int d^3 V (1, 3) \lim_{\substack{4 \rightarrow 3 \\ t_4 > t_3 > t_1, t_4 \rightarrow t_1}} G (3, 1, 4, 2) = \delta (1-2). \quad (20. 16)$$

Если бы в левой части этого уравнения стоял не оператор $i \frac{\partial}{\partial t} - T$, а $i \frac{\partial}{\partial t} - T - W$, то деля на него обе части выражения (20. 16), мы смогли бы выразить $G (1, 2)$ через G_0 и парную функцию Грина. Привести уравнение (20. 16) к такому виду можно, если учесть соотношение

$$W_{q_1} G (1, 2) = \int d^3 V (1, 3) [R (q_3, q_3) G (1, 2) - R (q_3, q_1) G (q_3, t_1, 2)],$$

вытекающее из определения оператора W (см. § 4). Вводя сюда вместо матрицы плотности функцию Грина G_0 и вычитая полученное из выражения (20. 16), найдем

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) G (1, 2) + i \int d^3 V (1, 3) \times \\ & \times \lim_{\substack{4 \rightarrow 3 \\ t_4 > t_3 > t_1, t_4 \rightarrow t_1}} \{ G (3, 1, 4, 2) - G_0 (3, 4) G (1, 2) + \\ & + G_0 (1, 4) G (3, 2) \} = \delta (1-2). \end{aligned}$$

В более компактном виде это уравнение можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} & G (1, 2) - G_0 (1, 2) = -i \int d^3 d^4 G_0 (1, 3) V (3, 4) \times \\ & \times \lim_{\substack{5 \rightarrow 4 \\ t_5 > t_4 > t_3 \\ t_5 \rightarrow t_3}} \{ G (4, 3, 5, 2) - G_0 (4, 5) G (3, 2) + G_0 (3, 5) G (4, 2) \}. \quad (20. 17) \end{aligned}$$

Проверить правильность этого соотношения проще всего, действуя на обе его части оператором $i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W$ и учитывая уравнение (10. 6); при этом (20. 17) сводится к предыдущему уравнению.

Соотношения иного типа, выражаемые так называемой теоремой Уорда, будут рассмотрены в разделе 20. 8.

Аналогичным образом, действуя оператором $i \frac{\partial}{\partial t} - T$ на парную функцию Грина, можно было бы найти связь между парной и трехчастичной функциями Грина и т. д. Такая совокупность

бесконечного числа уравнений, каждое из которых связывает две соседних по порядку функции Грина, могла бы в принципе служить для их нахождения. Ясно, однако, что решение этой системы «зацепляющихся» уравнений требует ее упрощения. В дальнейшем мы не будем этой системой пользоваться.

20. 5. Сопоставляя соотношения (20. 17) и (19. 7), можно выразить через парную функцию Грина, а затем и через вершинную часть массовый оператор M . Это выражение будет использовано для получения одночастичной функции Грина. Вычитая из уравнения (19. 7) соотношение (20. 17) и действуя слева на эту разность оператором $i \frac{\partial}{\partial t} - T - W$, получим

$$\int d4M(1, 4)G(4, 2) = -i \int d4V(1, 4) \lim_{\substack{5 \rightarrow 4 \\ t_5 > t_4 > t_1 \\ t_5 \rightarrow t_1}} \times \\ \times \{G(4, 1, 5, 2) - G_0(4, 5)G(1, 2) + G_0(1, 5)G(4, 2)\}.$$

Подставляя в правую часть этого равенства выражение (20. 12), приведем ее к виду

$$-i \int d4V(1, 4) \{ [G(4, 5) - G_0(4, 5)]G(1, 2) - \\ - [G(1, 5) - G_0(1, 5)]G(4, 2) + 4 \int d6 d7 d8 d9G(4, 6) \times \\ \times G(1, 7)\Delta(6, 7, 8, 9)G(8, 5)G(9, 2)\}.$$

Меня соответствующим образом обозначения, можно добиться того, что это выражение будет содержать справа функцию $G(4, 2)$. Выделим выражение для самого массового оператора:

$$M(1, 2) = M_1(1, 2) + M_2(1, 2) - \\ - 4i \int d3 d4 d5 d6 \lim_{\substack{7 \rightarrow 3 \\ t_7 > t_5 > t_1}} V(1, 3)G(3, 4)G(1, 5)\Delta(4, 5, 6, 2)G(6, 7), \quad (20. 18)$$

где

$$\left. \begin{aligned} M_1(1, 2) &= -i\delta(1-2) \int d3V(1, 3) \lim_{\substack{4 \rightarrow 3 \\ t_4 > t_5 > t_1}} [G(3, 4) - G_0(3, 4)], \\ M_2(1, 2) &= i \int d3V(1, 3) \lim_{\substack{4 \rightarrow 3 \\ t_4 > t_5 > t_1}} [G(1, 4) - G_0(1, 4)]. \end{aligned} \right\} \quad (20. 19)$$

На рис. 45 приведена диаграмма, отвечающая третьему члену выражения (20. 18). Типичные диаграммы M_1 и M_2 изображены на рис. 46, *a* и *b* соответственно. В рассматриваемых ниже конкретных задачах вклад M_1 и M_2 в массовый оператор имеет пренебрежимо малую величину.

20. 6. Помимо уже рассмотренной информации парная функция Грина содержит также специфические сведения о системе, которые нельзя получить из одночастичной функции G .

Сюда относятся прежде всего корреляционные характеристики системы, позволяющие отразить влияние двух частиц системы друг на друга. Естественной мерой корреляционного воздействия пары частиц может служить разность

$$K(1, 2, 3, 4) = G(1, 2, 3, 4) - \tilde{G}(1, 2, 3, 4). \quad (20.20)$$

Эта величина описывает только динамические корреляции и в приближении Хартри—Фока обращается в нуль. Из соотношения (20.20) можно получить всевозможные корреляционные характеристики системы. Рассмотрим подробно корреляцию координат.

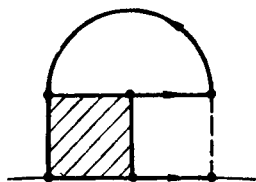


Рис. 45

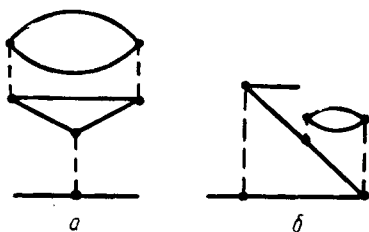


Рис. 46

Введем оператор плотности числа частиц $n(q) = \psi^+(q)\psi(q)$ (см. § 3). Среднее значение произведения операторов $\langle \Psi | n(q_1)n(q_2) | \Psi \rangle$ можно представить в виде

$$\lim_{\substack{3 \rightarrow 1, 4 \rightarrow 2 \\ t_3 > t_1 > t_4 > t_2, t_3 \rightarrow t_2}} G(1, 2, 3, 4);$$

оно будет отличаться от произведения средних значений операторов $n(q)$, каждое из которых может быть записано в форме

$$\langle \Psi | n(q_1) | \Psi \rangle = i \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 > t_1}} G(1, 2) = \lim_{q_2 \rightarrow q_1} R(q_1, q_2).$$

Соответствующая разность и служит обычно мерой корреляции координат частиц; она записывается в виде

$$\begin{aligned} \langle \Psi | n(q_1)n(q_2) | \Psi \rangle - \langle \Psi | n(q_1) | \Psi \rangle \langle \Psi | n(q_2) | \Psi \rangle = \\ = \langle \Psi | n(q_1) | \Psi \rangle \langle \Psi | n(q_2) | \Psi \rangle f(q_1, q_2), \end{aligned} \quad (20.21)$$

где функция f отражает вероятность нахождения частицы в координатном состоянии q_1 (т. е. в точке x_1 с определенным значением дискретных координат) при заданном положении другой частицы в точке q_2 . По состояниям остальных частиц системы производится при этом усреднение.

Правую часть соотношения (20.21) нетрудно выразить через парную функцию Грина. Используя выражение (20.20), находим

$$\lim_{\substack{3 \rightarrow 1, 4 \rightarrow 2 \\ t_3 > t_1 > t_4 > t_2, t_3 \rightarrow t_2}} K(1, 2, 3, 4) = R(q_1, q_2) R(q_2, q_1). \quad (20.22)$$

Первый член этого выражения описывает динамическую, второй — обменную часть корреляций.

В приближении Хартри—Фока остается только вторая часть. Вычислим соответствующее выражение для функции f , ограничиваясь рассмотрением однородной системы

$$\begin{aligned} R_0(q_1, q_2) &= \delta_{q_1 q_2} \int d^3 p \theta(p_0^2 - p^2) \exp[i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)] = \\ &= -\frac{p_0^3}{2\pi^2} \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\sin \xi}{\xi} \right) \delta_{q_1 q_2}, \\ \langle \Psi | \mathbf{n}(q) | \Psi \rangle &= \frac{g p_0^3}{6\pi^2}, \end{aligned}$$

где g — фактор вырождения; $\xi = p_0 |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$. Для функции f отсюда получается выражение

$$f(\xi) = -\frac{9}{\xi^6} (\sin \xi - \xi \cos \xi)^2 \delta_{q_1 q_2}. \quad (20.23)$$

Эта величина быстро падает с увеличением ξ , что соответствует ослаблению статистического влияния частиц с их удалением друг от друга. Напротив, при $\xi < 1$, т. е. на расстояниях, меньших средней длины волны частиц, величина f близка к -1 и стремится к этому значению с уменьшением ξ , а среднее значение $\langle \Psi | \mathbf{n}(q_1) \mathbf{n}(q_2) | \Psi \rangle$ стремится к нулю. Это обстоятельство соответствует невозможности нахождения двух ферми-частиц в одной точке. Сказанное относится лишь к частицам, у которых совпадают значения дискретных координат. Это, очевидно, находится в полном соответствии с принципом Паули.

20. 7. Еще одна важная величина, сведения о которой даются парной функцией Грина, описывает изменение состояния системы под действием слабых внешних агентов (в частности, внешних силовых полей).

Пусть гамильтониан взаимодействия системы с указанными внешними агентами имеет вид

$$\delta H = \int dq \psi^\dagger(q) \delta U \psi(q), \quad (20.24)$$

т. е. носит характер одночастичного оператора. Оператор δU имеет смысл плотности энергии соответствующего взаимодействия.

Например, если имеется в виду внешнее магнитное поле \vec{H} , то $\delta U = -\vec{M} \vec{H}$, где \vec{M} — намагниченность системы.

Попробуем найти изменение одночастичной функции Грина за счет δH , считая его малым. Будем исходить из общего выражения для функции Грина в представлении взаимодействия*:

$$G(1, 2) = -i \frac{\langle \Psi_0 | T [\psi_b(1) \psi_b^\dagger(2) S] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}. \quad (20.25)$$

* Строго говоря, это выражение, опирающееся на условие устойчивости Ψ_0 , справедливо только для не зависящих от времени δU .

Здесь S -матрица определяется уравнением

$$i \frac{\partial S}{\partial t} = (H'_B + \delta H_B) S \quad (20.26)$$

и описывает эволюцию системы под действием как гамильтониана взаимодействия между частицами H' , так и гамильтониана δH .

Если обозначить через S_0 решение уравнения (20.26) при $\delta H = 0$, то, полагая $S = S_0 + \delta S$, получим уравнение

$$i \frac{\partial \delta S}{\partial t} = H'_B \delta S + \delta H_B S_0.$$

Его решение, как легко проверить подстановкой, имеет вид

$$\begin{aligned} \delta S(t, -\infty) &= -i \int_{-\infty}^t d\tau S_0(t, \tau) \delta H_B(\tau) S_0(\tau, -\infty) = \\ &= -i \int_{-\infty}^t d\tau T [\delta H_B(\tau) S_0(t, -\infty)]. \end{aligned} \quad (20.27)$$

Записывая поправку к $G(1, 2)$ за счет внешнего воздействия в виде $\delta G(1, 2)$, получим

$$\begin{aligned} \delta G(1, 2) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle \Psi_0 | S_0 | \Psi_0 \rangle^{-1} \times \\ &\times \{ i \langle \Psi_0 | T [\delta H_B(\tau) S_0] | \Psi_0 \rangle G(1, 2) - \\ &- \langle \Psi_0 | T [\Psi_B(1) \Psi_B^+(2) \delta H_B(\tau) S_0] | \Psi_0 \rangle \}. \end{aligned}$$

Вспоминая определения функций Грина, можно написать

$$\delta G(1, 2) = \int d^3 \delta U(3) \lim_{4 \rightarrow 3} \{ G(1, 2) G(3, 4) - G(1, 3, 2, 4) \}. \quad (20.28')$$

Используя уравнение (20.12), можно также выразить $\delta G(1, 2)$ через вершинную часть Δ :

$$\begin{aligned} \delta G(1, 2) &= \int d^3 [G(1, 3) \delta U(3) G(3, 2) + \\ &+ 4 \int d^4 d^5 d^6 d^7 G(1, 4) \delta U(3) G(3, 5) \times \\ &\times \Delta(4, 5, 6, 7) G(6, 2) G(7, 3)]. \end{aligned} \quad (20.29)$$

Введем далее так называемую обратную функцию Грина $G^{-1}(1, 2)$, которая определяется условием

$$\int d^2 G^{-1}(1, 2) G(2, 3) = \int d^2 G(1, 2) G^{-1}(2, 3) = \delta(1 - 3).$$

Очевидно, что в импульсном представлении

$$G^{-1}(\vec{p}, \epsilon) = [G(\vec{p}, \epsilon)]^{-1}.$$

Обратная функция Грина тесно связана с массовым оператором:

$$G^{-1}(1, 2) = G_0^{-1}(1, 2) + M(1, 2).$$

В самом деле, к этому соотношению можно прийти, умножая уравнение Дайсона слева на $G_0^{-1}(3, 1)$ и справа на $G^{-1}(2, 4)$ и интегрируя по 2 и 3. Из определения обратной функции Грина вытекает соотношение

$$\delta G^{-1}(1, 2) = - \int d3 d4 G^{-1}(1, 3) \delta G(3, 4) G^{-1}(4, 2).$$

Умножим теперь уравнение (20. 29) слева на $G^{-1}(\dots 1)$ и справа на $G^{-1}(2, \dots)$ и проинтегрируем по 1 и 2.

Тогда

$$\begin{aligned} \delta G^{-1}(1, 2) &= \delta G_0^{-1}(1, 2) + \delta M(1, 2) = -\delta U(1) \delta(1-2) - \\ &- 4 \int d3 d4 d5 \delta U(3) G(3, 4) \Delta(1, 4, 2, 5) G(5, 3). \end{aligned} \quad (20. 30)$$

Фактически здесь содержится два независимых соотношения, поскольку изменение G_0^{-1} в точности равно первому слагаемому правой части выражения (20. 30). Поэтому можно написать просто

$$\delta M(1, 2) = -4 \int d3 d4 d5 \delta U(3) G(3, 4) \Delta(1, 4, 2, 5) G(5, 3).$$

20. 8. Помимо важной для кинетики задачи об изменении функции Грина под влиянием заданного возмущения полученные уравнения удобно применять также для нахождения некоторых соотношений общего характера. С этой целью следует выбрать такой оператор δU , для которого изменение функции Грина заранее известно.

Выберем, в частности, $\delta U = \alpha = \text{const}$; при этом оператор δH равен αN , где N — оператор полного числа частиц, коммутирующий с полным гамильтонианом системы. По этой причине точная волновая функция системы Ψ вообще не изменяется при прибавлении δH (с точностью до несущественного фазового множителя), а оператор $\Psi_r(1)$ приобретает множитель $\exp(-i\alpha t_1)$. В этом можно убедиться, учитывая, что уравнение для возмущенного оператора Ψ_r имеет вид

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - \alpha \right) \Psi_r(1) = \int d2 \Psi_r^+(2) V(1, 2) \Psi_r(2) \Psi_r(1).$$

Таким образом, полное изменение функции Грина (19. 3) равно

$$\delta G(1, 2) = -i\alpha(t_1 - t_2) G(1, 2).$$

Соответственно

$$\delta G^{-1}(1, 2) = -i\alpha(t_1 - t_2) G^{-1}(1, 2).$$

Подстановка этого выражения в соотношение (20. 30) дает

$$\begin{aligned} (t_1 - t_2) G^{-1}(1, 2) &= -i\delta(1-2) - \\ &- 4i \int d3 d4 d5 G(3, 4) \Delta(1, 4, 2, 5) G(5, 3). \end{aligned} \quad (20. 31)$$

Это соотношение, выражающее еще одну связь между одночастичной и парной функциями Грина, дает в импульсном представлении * одно из так называемых равенств Уорда. Его отличие от соотношения (20. 17) состоит в том, что оно содержит только эффективное взаимодействие Δ , в то время как (20. 17) включает в себя и истинный потенциал взаимодействия V .

Аналогичное равенство Уорда можно написать и для величины $(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) G^{-1}$ [90].

20. 9. В литературе приводится и другое выражение для $\delta G(1, 2)$ [88]. Для его вывода используем прием, позволяющий избежать предположения о независимости от времени оператора δU .

Итак, пусть гамильтониан внешнего возмущения имеет вид выражения (20. 24) с δU , зависящим от времени. При этом выражение (20. 25) должно быть заменено более общим выражением

$$G(1, 2) = -i \langle \Psi_0 | S^+ T [\psi_B(1) \psi_B^+(2) S] | \Psi_0 \rangle.$$

Вычисление поправки к S -матрице по-прежнему может проводиться по формуле (20. 27). Для поправки к функции Грина получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} \delta G(1, 2) = & \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \{ \langle \Psi_0 | S_0^+(\tau, -\infty) \delta H(\tau) S_0^+(\infty, \tau) \times \\ & \times T [\psi_B(1) \psi_B^+(2) S_0] | \Psi_0 \rangle - \\ & - \langle \Psi_0 | T [\psi_B(1) \psi_B^+(2) \delta H(\tau) S_0] | \Psi_0 \rangle \}. \end{aligned}$$

Можно перейти к представлению Гейзенберга с помощью общих соотношений, приведенных в гл. III. Это дает

$$\begin{aligned} \delta G(1, 2) = & \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \{ \langle \Psi | \delta H_r(\tau) T [\psi_r(1) \psi_r^+(2)] | \Psi \rangle - \\ & - \langle \Psi | T [\psi_r(1) \psi_r^+(2) \delta H_r(\tau)] | \Psi \rangle \}. \end{aligned} \quad (20. 32)$$

Из этого выражения видно, что область интегрирования по τ от t_1 до ∞ (при $t_1 > t_2$) или от t_2 до ∞ (при $t_1 < t_2$) автоматически выпадает.

* При переходе к импульсному представлению необходима некоторая осторожность, связанная с неоднозначностью подынтегрального выражения [89, 90¹]. В импульсном представлении левая часть соотношения (20. 31) имеет вид

$$-i \frac{\partial}{\partial \epsilon} G^{-1}(\vec{p}, \epsilon).$$

Рассмотрим изменение матрицы плотности под действием внешнего возбудителя. Полагая в соотношении (20.32) $t_2 \rightarrow t_1 \rightarrow +0$, имеем

$$\delta R(q_1, q_2, t_1) = i \int_{-\infty}^{t_1} d\tau \langle \Psi | [\delta H_r(\tau), \Psi_r^\dagger(q_2, t_1) \Psi_r(q_1, t_1)] | \Psi \rangle.$$

Этот коммутатор, конечно, нельзя вычислить в явном виде, поскольку операторы отнесены к разным моментам времени.

Сведем полученное выражение к парной функции Грина. Среднее значение перепишем прежде всего в форме

$$-A(q_1, q_2) + A^*(q_2, q_1),$$

где

$$A(q_1, q_2) \equiv \langle \Psi | \Psi_r^\dagger(q_2, t_1) \Psi_r(q_1, t_1) \delta H_r(\tau) | \Psi \rangle.$$

Эту последнюю величину уже нетрудно записать в виде

$$\int dq_3 \delta U_{q_3}(t_3) \lim_{\substack{4 \rightarrow 3 \\ t_2 > t_1 > t_4 > t_3 \\ t_2 \rightarrow t_1}} G(1, 3, 2, 4).$$

Таким образом, окончательно имеем

$$\delta R(q_1, q_2, t_1) = \int_{-\infty}^{t_1} d^3 \delta U(3) \times \\ \times \lim_{\substack{4 \rightarrow 3 \\ t_2 > t_1 > t_4 > t_3, t_2 \rightarrow t_1}} [G(1, 3, 4, 2) - G^*[1, 3, 4, 2]]. \quad (20.33)$$

Знание парной функции Грина невозмущенной системы дает возможность вычислить одночастичные характеристики слабо-возмущенной системы. Полученное соотношение определяет ряд кинетических характеристик системы, в частности величину проводимости.

§ 21. ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ (ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ — ФОКА)

21.1. В предыдущих параграфах речь шла почти исключительно об основном состоянии системы. Важную роль в теории многих частиц играют также вопросы, связанные с возбужденными состояниями системы, энергия которых отлична от минимальной.

Наряду с возбужденными состояниями системы, содержащей то же число частиц (N), что и в основном состоянии, значительный интерес представляют также возбужденные состояния системы с иным числом частиц *. В первую очередь имеются в виду воз-

* В дальнейшем мы будем указывать число частиц в аргументе волновой функции. Возбужденные состояния системы N частиц будут называться парными, системы $N \pm 1$ частиц — одночастичными (однодырочными).

бужденные состояния системы с одной лишней частицей или дыркой, т. е. содержащие $N \pm 1$ частицу.

Важный класс задач теории многих частиц сводится к исследованию взаимодействия некоторой внешней частицы с системой частиц того же сорта. Попадая в такую систему, частица может отдать ей значительную долю своей энергии, возбудить систему и «застрянуть» в ней на более или менее длительное время. Возникшее состояние системы принадлежит, очевидно, к обсуждаемому классу.

21. 2. Рассмотрение возбужденных состояний системы, как и основного состояния, целесообразно начать с приближения Хартри—Фока. Обозначая через Ψ_{0n} и E_{0n} соответственно волновую функцию и энергию возбужденного состояния, можно написать

$$H_0 \Psi_{0n} = E_{0n} \Psi_{0n}, \quad (21. 1)$$

где принято, что гамильтониан нулевого приближения H_0 совпадает с выражением (4. 29). При таком выборе H_0 самосогласование проводится лишь в рамках конфигурации, отвечающей основному состоянию системы. Соответственно только это последнее состояние описывается наилучшим образом (см. § 4). В принципе можно было бы строить для каждого состояния свой гамильтониан нулевого приближения, требуя минимума величины $\langle \Psi_{0n} | (H - H_0)^2 | \Psi_{0n} \rangle$. Но такая постановка задачи привела бы к неоправданному усложнению аппарата. Поэтому гамильтониан приближения Хартри—Фока здесь и в дальнейшем выбран единым для всех конфигураций; он дает наилучшее описание основного состояния системы. В следующей главе, посвященной квантовой статистике, гамильтониан H_0 выбирается из условия $\langle (H - H_0)^2 \rangle_0 = \min$, где символ $\langle \dots \rangle_0$ означает статистическое усреднение по ансамблю Гиббса. Он дает наилучшее описание системы в среднем.

Теперь для описания возбужденных состояний системы можно сохранить весь развитый выше аппарат. В частности, сохраняют свой вид волновые функции базиса χ_{ν} , выражения для операторов поля: Имеются, однако, два обстоятельства, которые приводят к некоторым особенностям описания возбужденных состояний системы. Первое состоит в том, что среднее по состоянию Ψ_{0n} от N -произведения операторов поля оказывается отличным от нуля. Второе обстоятельство связано с вырождением возбужденных уровней энергии.

21. 3. Рассмотрим некоторые свойства решений уравнения (21. 1), которому удовлетворяют волновые функции состояний с фиксированными числами заполнения. Частное решение уравнения (21. 1) для парного возбужденного состояния можно всегда выбрать в виде

$$\Psi_{0n}(N) = \prod_{i, j=1}^k a_{\nu_i}^+ b_{\mu_j}^+ \Psi_0. \quad (21. 2)$$

Оно отвечает наличию k пар с частицами, находящимися в состояниях v_i , и дырками в состояниях μ_j ; при этом $\varepsilon_{v_i} > \varepsilon_F$, $\varepsilon_{\mu_j} < \varepsilon_F$. Аналогично для одночастичного возбужденного состояния системы можно написать

$$\Psi_{0n}(N+1) = a_v^+ \prod_{i,j=1}^k a_{v_i}^+ b_{\mu_j}^+ \Psi_0. \quad (21.3)$$

Число k в обоих случаях ничем не фиксировано, но должно быть меньше полного числа частиц N .

Чтобы непосредственно убедиться в том, что выражения (21.2) и (21.3) действительно удовлетворяют уравнению (21.1), и вычислить соответствующую энергию E_{0n} , рассмотрим коммутаторы:

$$[H_0, a_v^+] = \varepsilon_v a_v^+, \quad [H_0, b_\mu^+] = -\varepsilon_\mu b_\mu^+.$$

Здесь использовано соотношение (4.3) и равенство $A_v^+ A_v = b_v b_v^+$ ($\varepsilon_v < \varepsilon_F$) (см. § 8). Таким образом, последовательно перенося оператор H_0 через операторы a^+ , b^+ в выражениях для Ψ_{0n} , мы действительно убеждаемся в том, что последние представляют собой собственные функции оператора H_0 . Что же касается их собственных значений, то та же процедура дает

$$E_{0n} = E_0 + \sum_v \varepsilon_v - \sum_\mu \varepsilon_\mu,$$

где суммирование производится по всем занятым состояниям частиц и дырок; величина E_0 — энергия основного состояния (см. § 4). Иначе говоря, можно записать следующее выражение для энергии возбужденного состояния системы:

$$E_{0n} - E_0 = \sum_v \varepsilon_v (n_v^{(p)} - n_v^{(h)}), \quad (21.4)$$

где $n_v^{(p)}$ — число заполнения частиц; $n_v^{(h)}$ — число заполнения дырок в рассматриваемом состоянии.

Разность $E_{0n} - E_0$ носит специальное название энергии возбуждения и обозначается через ΔE_{0n} . Для одночастичного возбужденного состояния эту величину можно представить в несколько ином виде, полагая N достаточно большой величиной. Запишем ΔE_{0n} для рассматриваемого случая, явно указывая число частиц:

$$\Delta E_{0n} = E_{0n}(N+1) - E_0(N).$$

Прибавляя и вычитая энергию основного состояния системы $N+1$ частиц $E_0(N+1)$, будем иметь

$$\Delta E_{0n} = \Delta' E_{0n} + \mu, \quad (21.5)$$

где $\Delta' E_{0n} = E_{0n}(N+1) - E_0(N+1)$ — энергия возбуждения собственно системы $N+1$ частиц (или, что то же при большом N ,

системы N частиц); $\mu = \frac{\partial E_0(N)}{\partial N} \approx E_0(N+1) - E_0(N)$ — химический потенциал системы. Для однодырочного состояния в выражении (21.5) следует изменить знак у μ .

21.4. Уровни энергии, отвечающие уравнению (21.1), являются, как правило, вырожденными*. Заданному значению энергии возбуждения ΔE_{0n} отвечает целое множество различных возбужденных состояний системы, которые могут различаться как числом пар, так и состояниями частиц и дырок, входящих в состав этих пар.

Начнем с рассмотрения парных возбужденных состояний. Простейшее состояние такого рода отвечает наличию одной пары; соответственно его энергия возбуждения записывается в виде $\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu$, где ν — состояние частицы, μ — состояние дырки. Совершенно ясно, что если соотношение

$$\Delta E_{0n} = \varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu$$

(ΔE_{0n} — заданная энергия возбуждения) может быть выполнено для разных состояний μ и ν , то факт вырождения рассматриваемого уровня проявляется непосредственным образом. Чаще всего спектр одночастичных состояний системы носит непрерывный (или почти непрерывный) характер. При этом обсуждаемое соотношение имеет множество решений. Общий вид волновой функции состояния с одной парой, имеющего энергию возбуждения ΔE_{0n} , имеет характер следующей суперпозиции:

$$\Psi_{0n}(N) = \sum_{\mu, \nu} C_{\mu\nu} \delta(\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu - \Delta E_{0n}) a_\nu^+ b_\mu^+ \Psi_0, \quad (21.6)$$

где $C_{\mu\nu}$ — соответствующие численные коэффициенты, а δ -функция обеспечивает постоянство энергии возбуждения.

Для одночастичного возбужденного состояния простейшей волновой функцией является выражение

$$\Psi_{0n}(N+1) = \sum_\nu C_\nu \delta(\varepsilon_\nu - \Delta E_{0n}) a_\nu^+ \Psi_0. \quad (21.7)$$

Здесь пары вообще отсутствуют, и вырождение связано с возможностью изменения состояния одной частицы при сохранении величины энергии; имеется в виду, в частности, изменение направления спина, импульса и т. п.

Другая причина вырождения состоит в возможности выбора разного числа пар k . Общее выражение для волновой функции состояния с энергией возбуждения ΔE_{0n} имеет, следовательно, вид

$$\Psi_{0n}(N) = \sum_{\nu, \mu, k} C_{\nu, \mu, k} \delta(\sum \varepsilon_{\nu_i} - \sum \varepsilon_{\mu_j} - \Delta E_{0n}) \times \\ \times \prod a_{\nu_i}^+ b_{\mu_j}^+ \Psi_0 \quad (21.8)$$

аналогично и для $\Psi_{0n}(N+1)$.

* Мы избежали вырождения основного состояния системы, ограничившись рассмотрением систем с заполненными оболочками.

21. 5. Приведенные разложения волновой функции возбужденного состояния системы можно представить и в более удобной форме:

$$\Psi_{0n}(N) = \left\{ \int dq_1 dq_2 \Phi_{0n}(q_1, q_2) N [\Psi^+(q_1) \Psi(q_2)] + \right. \\ \left. + \int dq_1, dq_2, dq_3, dq_4 \Phi_{0n}(q_1, q_2, q_3, q_4) \times \right. \\ \left. \times N [\Psi^+(q_1) \Psi^+(q_3) \Psi(q_2) \Psi(q_4)] + \dots \right\} \Psi_0; \quad (21.9)$$

$$\Psi_{0n}(N+1) = \left\{ \int dq_1 \Phi_{0n}(q_1) \Psi^+(q_1) + \int dq_1 dq_2 dq_3 \times \right. \\ \left. \times \Phi_{0n}(q_1, q_2, q_3) N [\Psi^+(q_1) \Psi^+(q_2) \Psi(q_3)] + \dots \right\} \Psi_0. \quad (21.10)$$

Здесь введены нормальные произведения операторов для того, чтобы остались лишь рождающие части операторов. Появление хотя бы одного оператора уничтожения частицы или дырки немедленно приводит к нулевому результату.

Функции Φ_{0n} , определяющие вес, с которым входит в Ψ_{0n} заданная конфигурация частиц и дырок, должны удовлетворять нескольким условиям. Мы обозначили выше через 1, 3, ... те аргументы Φ_{0n} , которым отвечают операторы рождения частиц, и через 2, 4, ... — операторы рождения дырок. Разлагая Φ_{0n} по системе функций χ_ν , т. е. переходя в энергетическое представление, нетрудно видеть, что соответствующие коэффициенты разложения можно выбрать отличными от нуля лишь в области выше границы Ферми для координат 1, 3, ..., и ниже границы Ферми — для координат 2, 4, ... Прочие области спектра автоматически выпадают из разложений (21.9), (21.10).

Помимо этого, функции Φ_{0n} должны быть такими, чтобы в рассматриваемые суперпозиции входили только состояния, отвечающие одной и той же энергии возбуждения ΔE_{0n} . Для этого необходимо, чтобы коэффициенты разложения Φ_{0n} по системе χ_ν содержали функцию $\delta(\epsilon_{\nu_1} + \epsilon_{\nu_2} + \dots - \epsilon_{\nu_2} - \epsilon_{\nu_4} - \dots - \Delta E_{0n})$, где со знаком (+) входят энергии, отвечающие координатам частиц q_1, q_3, \dots , со знаком (—) — отвечающие координатам дырок q_2, q_4, \dots . В частности,

$$\Phi_{0n}(q_1) = \sum_{\nu} \alpha_{\nu} (1 - n_{\nu}) \delta(\epsilon_{\nu} - \Delta E_{0n}) \chi_{\nu}(q_1),$$

$$\Phi_{0n}(q_1, q_2) = \sum_{\mu\nu} \alpha_{\mu\nu} n_{\mu} (1 - n_{\nu}) \delta(\epsilon_{\nu} - \epsilon_{\mu} - \Delta E_{0n}) \chi_{\mu}^*(q_2) \chi_{\nu}(q_1),$$

где α — некоторые численные коэффициенты.

Указанные особенности функций Φ_{0n} приводят к важным соотношениям. Учитывая разложение матрицы плотности

$$R_0(q_1, q_2) = \sum_{\nu} n_{\nu} \chi_{\nu}^*(q_2) \chi_{\nu}(q_1),$$

находим

$$\int dq_2 R_0(q_1, q_2) \Phi_{0n}(q_2) = 0. \quad (21.11)$$

Подобные соотношения можно написать и для функции $\Phi_{0n}(q_1, q_2)$:

$$\left. \begin{aligned} \int dq_1 R_0(q_1, q_2) \Phi_{0n}(q_2, q_1) &= 0, \\ \int dq_2 R_0(q_1, q_2) \Phi_{0n}(q_2, q_1) &= \Phi_{0n}(q_1, q_1). \end{aligned} \right\} \quad (21.12)$$

С помощью полученных соотношений и разложений (21.9), (21.10) нетрудно убедиться в том, что весовые функции Φ_{0n} могут быть представлены в виде матричных элементов следующего вида:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{0n}(q_1) &= \langle \Psi_0 | \psi(q_1) | \Psi_{0n}(N+1) \rangle, \\ \Phi_{0n}(q_1, q_2) &= \langle \Psi_0 | \psi^+(q_2) \psi(q_1) | \Psi_{0n}(N) \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (21.13)$$

21.6. Полезно ввести зависящие от времени весовые функции

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{0n}(1) &= \langle \Psi_0 | \psi_B(1) | \Psi_{0n}(N+1) \rangle, \\ \Phi_{0n}(1, 2) &= \langle \Psi_0 | T[\psi_B^+(2) \psi_B(1)] | \Psi_{0n}(N) \rangle \end{aligned} \right\} \quad (21.14)$$

и т. д. Они переходят в функции (21.13) при $t_1 \rightarrow 0$ и $t_1, t_2 \rightarrow 0$ соответственно. Фактически символ T -произведения в последнем равенстве мы пишем лишь для удобства последующих выкладок. Разность между $T(\psi^+\psi)$ и $\psi^+\psi$ сводится к c -числу и с учетом ортогональности состояний Ψ_0 и Ψ_{0n} вообще никак не проявляется.

Учитывая уравнения движения для оператора в представлении взаимодействия, легко получить следующие уравнения:

$$\left. \begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) \Phi_{0n}(1) &= 0, \\ \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) \Phi_{0n}(1, 2) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (21.15)$$

и сопряженное уравнение для производной по t_2 .

Не составляет труда найти явную зависимость приведенных величин от времени. Используя соотношение (2.8), получим

$$\Phi_{0n}(1) = \Phi_{0n}(q_1) \exp(-i\Delta E_{0n}t_1). \quad (21.16)$$

Аналогично можно показать, что

$$\Phi_{0n}(1, 2) = \Phi_{0n}(q_1, 0; q_2, \tau) \exp(-i\Delta E_{0n}t_1). \quad (21.16')$$

Здесь $\tau = t_2 - t_1$. Таким образом, рассматриваемые матричные элементы в отличие от средних значений зависят не только от разности времен, но и от абсолютных их значений.

Для зависящих от времени функций Φ_{0n} можно также написать ряд соотношений, подобных (21.11) и (21.12). Примем во внимание разложение свободной функции Грина (10.5)

$$G_0(1, 2) = -i \sum_{\nu} \chi_{\nu}^*(q_2) \chi_{\nu}(q_1) \exp[-i\epsilon_{\nu}(t_1 - t_2)] \begin{cases} 1 - n_{\nu} & t_1 > t_2 \\ -n_{\nu} & t_1 < t_2 \end{cases}$$

и зависимость от времени (21. 16), (21. 16'). Тогда с учетом разложений функций $\Phi_{0n}(q_1)$ и т. д. имеем

$$\int dq_2 G_0(1, 2) \Phi_{0n}(2) = -i\theta(t_1 - t_2) \Phi_{0n}(1). \quad (21. 17)$$

Аналогично можно показать, что

$$\left. \begin{aligned} \int dq_2 G_0(1, 2) \Phi_{0n}(2, 3) &= 0 & t_1 < t_2, \\ \int dq_2 \Phi_{0n}(3, 2) G_0(2, 1) &= 0 & t_1 < t_2, \\ \int dq_1 dq_2 G_0(1, 2) \Phi_{0n}(2, 1) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (21. 18)$$

Выразим далее волновую функцию возбужденного состояния системы через зависящие от времени функции $\Phi_{0n}(1)$ и т. п.

$$\Psi_{0n}(N) = \int dq_1 dq_2 \Phi_{0n}(1, 2) N [\psi_v^+(1) \psi_v(2)] \Psi_0 + \dots \quad (21. 19)$$

$$\Psi_{0n}(N+1) = \int dq_1 \Phi_{0n}(1) \psi_v^+(1) \Psi_0 + \dots \quad (21. 20)$$

Все сводится к замене $\Phi_{0n}(q_1)$ на $\Phi_{0n}(1)$ и т. п., а также операторов в представлении Шредингера операторами в представлении взаимодействия.

Чтобы убедиться в справедливости этого утверждения, подставим в соотношение (21. 20) выражение (21. 14) и разложения операторов поля. Это даст

$$\begin{aligned} \Psi_{0n}(N+1) &= \int dq_1 \sum_{\mu, \nu} \langle \Psi_0 | \alpha_\nu | \Psi_{0n} \rangle \times \\ &\times \alpha_\mu^+ \chi_\nu(q_1) \chi_\mu^*(q_1) \exp[-i(\epsilon_\mu - \epsilon_\nu)t_1] \Psi_0. \end{aligned}$$

Используя ортогональность функций χ_ν , нетрудно убедиться в том, что время t_1 из этого выражения полностью выпадает, т. е. мы возвращаемся к выражению (21. 10). Аналогично доказывается и соотношение (21. 19).

21. 7. Выясним физический смысл величин Φ_{0n} . Выше уже отмечалось, что эти величины определяют вклад, который вносит в волновую функцию возбужденного состояния заданная конфигурация частиц и дырок. Имеется и более непосредственная физическая интерпретация этих величин. Как видно из их разложений по системе χ_ν , функция $\Phi_{0n}(q_1)$ представляет собой просто волновую функцию «лишней» частицы, присутствие которой обуславливает отличие рассматриваемого состояния системы $\Psi_{0n}(N+1)$ от основного состояния.

Аналогично функцию $\Phi_{0n}(q_1, q_2)$ можно трактовать как волновую функцию пары, возникшей «на фоне» основного состояния. При этом $\chi_\nu(q_1)$ представляет собой волновую функцию частицы, а $\chi_\nu^*(q_2)$ — волновую функцию дырки. По этому поводу нужно заметить, что дырка должна описываться именно сопряженной волновой функцией. Это следует из сопоставления частей операторов поля, отвечающих рождению (или уничтожению) частиц и дырок [см. выражение (8. 4)].

Подобным же образом интерпретируются и более сложные функции Φ_{0n} . В целом можно сказать, что Φ_{0n} является волновой функцией того комплекса частиц и дырок, присутствию которого обязано отличие функции Ψ_{0n} и Ψ_0 .

Несколько слов о нормировке волновых функций. Учитывая взаимную ортогональность слагаемых разложений (21. 9), (21. 10) (она следует из того, что соответствующее скалярное произведение содержит среднее значение от неравного числа операторов рождения и уничтожения и потому обращается в нуль), нетрудно видеть, что условие $\langle \Psi_{0n} | \Psi_{0n} \rangle = 1$ дает

$$\left. \begin{aligned} \int dq_1 |\Phi_{0n}(q_1)|^2 + \dots &= 1, \\ \int dq_1 dq_2 |\Phi_{0n}(q_1, q_2)|^2 + \dots &= 1. \end{aligned} \right\} \quad (21. 21)$$

Здесь мы выписали лишь первые члены соответствующих разложений. В дальнейшем будут приведены результаты, относящиеся к тому же ограничению; обобщение на случай учета последующих членов разложений (21. 9), (21. 10) производится очевидным образом.

Рассмотрим некоторые физические характеристики возбужденного состояния и прежде всего его матрицу плотности, которая определяется соотношением

$$R_{0n}(q_1, q_2) = \langle \Psi_{0n} | \psi_b^+(q_2) \psi_b(q_1) | \Psi_{0n} \rangle. \quad (21. 22)$$

Подставляя сюда разложения (21. 9), (21. 10), найдем для одночастичного возбужденного состояния системы

$$R_{0n}(q_1, q_2) = \int dq_3 dq_4 \Phi_{0n}(q_3) \Phi_{0n}^*(q_4) \times \\ \times \langle \Psi_0 | \psi_b(q_4) \psi_b^+(q_2) \psi_b(q_1) \psi_b^+(q_3) | \Psi_0 \rangle.$$

Выполняя усреднение по формулам приложения А и используя соотношения (21. 11) и (21. 17), получим

$$R_{0n}(q_1, q_2) = R_0(q_1, q_2) + \Phi_{0n}^*(q_2) \Phi_{0n}(q_1). \quad (21. 23)$$

Это соотношение выражает матрицу плотности возбужденного состояния как сумму матриц плотности основного состояния и комплекса, волновой функцией которого является Φ_{0n} .

Для парного возбужденного состояния системы в результате громоздких, но несложных выкладок получаем

$$R_{0n}(q_1, q_2) = R_0(q_1, q_2) + \\ + \int dq_3 [\Phi_{0n}^*(q_2, q_3) \Phi_{0n}(q_1, q_3) - \Phi_{0n}^*(q_3, q_1) \Phi_{0n}(q_3, q_2)]. \quad (21. 24)$$

Здесь первый член в квадратной скобке — матрица плотности частицы, второй — матрица плотности дырки; знак (—) отражает отсутствие частицы в данном состоянии.

Важной характеристикой возбужденного состояния системы N частиц является также следующий матричный элемент:

$$M_{0n} = \langle \Psi_0 | A | \Psi_{0n} \rangle,$$

где A — некоторый оператор, описывающий внешний возбудитель, способный привести к возбуждению системы. Величина M_{0n} позволяет вычислить вероятность возбуждения системы. Чаще всего оператор A носит одночастичный характер. При этом

$$M_{0n} = \int dq_1 \langle \Psi_0 | \Psi^+(q_1) A_{q_1} \Psi(q_1) | \Psi_{0n} \rangle = \\ = \int dq_1 \lim_{q_2 \rightarrow q_1} A_{q_1} \Phi_{0n}(q_1, q_2). \quad (21.25)$$

Рассматриваемая величина непосредственно связана, таким образом, с весовой функцией Φ_{0n} .

§ 22. ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ (УЧЕТ КОРРЕЛЯЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ)

22. 1. До сих пор возбужденные состояния системы рассматривались в приближении Хартри—Фока. Примем теперь во внимание корреляционное взаимодействие между частицами и свяжем точную волновую функцию возбужденного состояния Ψ_n с введенной выше величиной Ψ_{0n} . Запишем эту величину в сокращенной форме:

$$\Psi_{0n} = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{0n}^{(\alpha)},$$

где $\Psi_{0n}^{(\alpha)}$ — волновые функции возбужденных состояний с одной и той же энергией возбуждения и с фиксированными числами заполнения.

Повторим рассуждения § 9, касающиеся связи Ψ и Ψ_0 , учитывая вырожденный характер рассматриваемого состояния системы. Это обстоятельство делает непригодным соотношение (9.18), которое должно быть теперь заменено общим соотношением *

$$S\Psi_{0n} = \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha} \langle \alpha | S | \beta \rangle \Psi_{0n}^{(\beta)}. \quad (22.1)$$

Суммирование здесь, как и в предыдущей формуле, ведется по состояниям одной и той же энергии.

Уравнение (9.23), которому удовлетворяет волновая функция в представлении взаимодействия $\Psi_{\text{вн}}(-\infty)$, по-прежнему остается в силе, поскольку при его выводе отсутствие вырождения никак не использовалось. Остается выяснить, при каких условиях функция Ψ_{0n} удовлетворяет тому же уравнению.

* Здесь введено обозначение

$$\langle \alpha | S | \beta \rangle = \langle \Psi_{0n}^{(\alpha)} | S | \Psi_{0n}^{(\beta)} \rangle.$$

Заметим, что

$$S^{-1}\Psi_{0n}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \langle \alpha | S^{-1} | \beta \rangle \Psi_{0n}^{(\beta)}.$$

Учитывая выражение (21. 8) и уравнение $H_0\Psi_{0n}^{(\alpha)} = E_{0n}\Psi_{0n}^{(\alpha)}$, убеждаемся в том, что

$$S^{-1}H^0S\Psi_{0n} = E_{0n}\Psi_{0n}.$$

Далее

$$\frac{i\delta}{2} S^{-1} \frac{\partial S}{\partial \lambda} \Psi_{0n} = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha}\sigma_{\alpha\beta}\Psi_{0n}^{(\beta)},$$

где

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i\delta}{2} \langle \alpha | S^{-1} \frac{\partial S}{\partial \lambda} | \beta \rangle.$$

Таким образом, подстановка Ψ_{0n} в уравнение (9. 23) дает систему уравнений

$$\sum_{\beta} C_{\beta} [(E_{0n} - E_n) \delta_{\alpha\beta} + \sigma_{\alpha\beta}] = 0. \quad (22. 2)$$

Решив эту систему, можно определить, во-первых, корреляционный вклад в энергию возбуждения $\Delta E_n = E_n - E$ и, во-вторых, те значения суперпозиционных коэффициентов C_{α} , для которых функция $\Psi_{0n} = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{0n}^{(\alpha)}$ удовлетворяет тому же уравнению, что и $\Psi_{\text{вн}}(-\infty)$. Используя доводы, приведенные в разделе 9. 7, можно заключить, что состояния $\Psi_{\text{вн}}(-\infty)$ и Ψ_{0n} имеют одинаковую энергию. Однако из-за вырожденного характера рассматриваемого случая еще нельзя сделать вывод о совпадении величин $\Psi_{\text{вн}}(-\infty)$ и Ψ_{0n} . Поэтому дальнейшие рассуждения будут отличаться от рассуждений раздела 9. 7.

Решение уравнений (22. 2) не единственно: имеется r (по числу подсостояний) наборов чисел $C_{\alpha}^{(i)}$ ($i = 1 \dots r$), для которых функция

$$\Psi_{0n}^{(i)} = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(i)} \Psi_{0n}^{(\alpha)}$$

удовлетворяет тому же уравнению, что и $\Psi_{\text{вн}}(-\infty)$. Можно ввести r функций $\Psi_{\text{вн}}^{(i)}(-\infty)$, каждая из которых равна $\Psi_{0n}^{(i)}$; это утверждение не противоречит вырожденности рассматриваемого уровня и сводится к выбору определенного базиса, по которому может быть разложено произвольное состояние $\Psi_{\text{вн}}(-\infty)$. Теперь можно написать

$$\Psi_n^{(i)} = S(0, -\infty) \Psi_{0n}^{(i)}. \quad (22. 3)$$

Таким образом, вырожденный в отсутствие корреляционного взаимодействия уровень при включении взаимодействия описывается совокупностью r точных волновых функций. Среди них могут быть функции, отвечающие одинаковому значению энергии, что свидетельствует о неполном снятии вырождения корреляционным взаимодействием.

22. 2. Из полученных результатов следует, что каждая из точных волновых функций возбужденного состояния системы связана S -матрицей с вполне определенной, а отнюдь не произвольной суперпозицией функций $\Psi_{0n}^{(\alpha)}$. Иными словами, при выключении взаимодействия функция $\Psi_n^{(i)}$ переходит в волновую функцию нулевого приближения, имеющую вполне определенные значения коэффициентов разложения C_α , нахождение которых требует решения уравнений (22. 2).

Такая ситуация типична для задачи с вырожденными уровнями энергии. Как известно из курса квантовой механики, среди всех возможных суперпозиций состояний одинаковой энергии имеются выделенные, «устойчивые» суперпозиции, характеризующиеся тем, что при наложении малого возмущающего потенциала они меняются тоже мало. При выключении взаимодействия волновая функция стационарного состояния системы переходит в устойчивую волновую функцию нулевого приближения.

Рассмотрим уравнения (22. 2), определяющие коэффициенты C_β , считая гамильтониан H' малым и ограничиваясь членами первого порядка. Используя разложение S -матрицы

$$S = 1 - i\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-\delta|t|) H'_v(t) + \dots,$$

будем иметь

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\delta}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-\delta|t|) \langle \alpha | H'_v(t) | \beta \rangle.$$

Но

$$\langle \alpha | H'_v | \beta \rangle = \langle \alpha | \exp(iH_0 t) H' \exp(-iH_0 t) | \beta \rangle = \langle \alpha | H' | \beta \rangle$$

из-за одинакового значения энергий состояний α и β . Вычисляя элементарный интеграл по t , найдем

$$\sigma_{\alpha\beta} = \langle \alpha | H' | \beta \rangle$$

и уравнения (22. 2) примут вид

$$\sum_{\beta} C_{\beta} [(E_{0n} - E_n) \delta_{\alpha\beta} + \langle \alpha | H' | \beta \rangle] = 0. \quad (22. 4)$$

Эти уравнения полностью совпадают с аналогичными уравнениями для определения коэффициентов устойчивого состояния в низшем порядке обычной теории возмущений [24].

Детерминант системы уравнений (22. 2), приравненный нулю, может иметь не равные друг другу корни $E_n - E_{0n}$. Это означает, что под действием корреляционного взаимодействия первоначально вырожденный уровень энергии расщепляется. Отсюда следует, что произвольным образом выбранная суперпозиция волновых функций приближения Хартри-Фока перейдет при включении корреляционного взаимодействия в нестационарное состояние системы.

В самом деле, указанную суперпозицию всегда можно переразложить по устойчивым волновым функциям, каждая из которых, эволюционируя во времени в соответствии с соотношением (22. 3), приведет к стационарному состоянию системы со своим значением энергии. Таким образом, результат эволюции произвольно выбранного состояния системы представляет собой суперпозицию стационарных состояний с различными значениями энергии. Такое состояние, очевидно, не является стационарным, и его энергия представляет собой неопределенную величину. Соответствующий разброс энергии определяется энергиями входящих в суперпозицию состояний.

Говоря об устойчивости возбужденного состояния системы, коэффициенты разложения волновой функции которого удовлетворяют уравнению (22. 2), мы по существу можем употреблять этот термин в том же смысле, что и в § 9 в применении к основному состоянию системы. Другими словами, если Ψ_{0n} является такого рода суперпозицией, то

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{S}\Psi_{0n} &= \langle \Psi_{0n} | \mathcal{S} | \Psi_{0n} \rangle \Psi_{0n}, \\ \Psi_{0n}^* \mathcal{S}^+ &= \langle \Psi_{0n} | \mathcal{S} | \Psi_{0n} \rangle^{-1} \Psi_{0n}^*. \end{aligned} \right\} \quad (22. 5)$$

Действительно, решение системы (22. 2) означает одновременно приведение матрицы $\sigma_{\alpha\beta}$ к диагональной форме. Отсюда

$$\mathcal{S}^{-1} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \lambda} \Psi_{0n} = \langle \Psi_{0n} | \mathcal{S}^{-1} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \lambda} | \Psi_{0n} \rangle \Psi_{0n},$$

что эквивалентно соотношениям (22. 5).

В заключение можно сказать, что рассмотрение возбужденных состояний системы в силу их вырожденного характера приводит к необходимости проводить дополнительный динамический расчет, сводящийся к нахождению устойчивых волновых функций нулевого приближения. Непосредственное решение этой задачи довольно трудно. В дальнейшем будут изложены некоторые обходные методы ее решения.

22. 3. При учете корреляционного взаимодействия между частицами выражения для матричных элементов Φ_{0n} примут вид *

$$\left. \begin{aligned} \Phi_n(q_1) &= \langle \Psi | \Psi(q_1) | \Psi_n(N+1) \rangle, \\ \Phi_n(q_1, q_2) &= \langle \Psi | \Psi^+(q_2) \Psi(q_1) | \Psi_n(N) \rangle \end{aligned} \right\} \quad (22. 6)$$

и т. д. Как и выше, здесь удобно ввести временные координаты, рассматривая выражения более общего вида:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_n(1) &= \langle \Psi | \Psi_T(1) | \Psi_n \rangle, \\ \Phi_n(1, 2) &= \langle \Psi | T[\Psi_T^+(2) \Psi_T(1)] | \Psi_n \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (22. 7)$$

* Эти соотношения, как и последующие, должны быть записаны для каждой из функций $\Psi_n^{(i)}$. Индекс i для простоты опускаем.

Обратный переход к функциям (22. 6) осуществляется следующим образом:

$$\Phi_n(q_1) = \lim_{t_1 \rightarrow 0} \Phi_n(1),$$

$$\Phi_n(q_1, q_2) = \lim_{t_1, t_2 \rightarrow 0} \Phi_n(1, 2).$$

В общем виде легко найти зависимость матричных элементов (22. 7) от времени. Используя общее соотношение (2. 5), имеем

$$\Phi_n(1) = \Phi_n(q_1) \exp(-i\Delta E_n t), \quad (22. 8)$$

где ΔE_n — точная энергия возбуждения. Что же касается функции $\Phi_n(1, 2)$, то для нее в полной аналогии с выражением (21. 16') получаем

$$\Phi_n(1, 2) = \Phi_n(q_1 0; q_2, \tau) \exp(-i\Delta E_n t_1), \quad (22. 9)$$

где $\tau = t_1 - t_2$.

Можно также написать

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \Phi_n(1, 2) = \Phi_n(q_1, q_2) \exp(-i\Delta E_n t_1). \quad (22. 10)$$

Выражения (22. 7) аналогично результатам § 15 можно записать и в представлении взаимодействия:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_n(1) &= \frac{\langle \Psi_0 | T | \Psi_B(1) S | \Psi_{0n}(N+1) \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}, \\ \Phi_n(1, 2) &= \frac{\langle \Psi_0 | T [\Psi_B^+(2) \Psi_B(1) S] | \Psi_{0n}(N) \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}. \end{aligned} \right\} \quad (22. 11)$$

Здесь мы использовали соотношение (22. 3) и условие устойчивости основного состояния.

Аналогичным образом можно ввести и матричные элементы типа

$$\tilde{\Phi}_n(1) = \langle \Psi | \Psi_B^+(1) | \Psi_n(N-1) \rangle, \quad (22. 12)$$

которые отвечают состоянию с одной недостающей частицей, или, что то же, с одной лишней дыркой.

22. 4. При учете корреляционного взаимодействия в возбужденных состояниях системы появляется необходимость иметь какие-то сведения об устойчивой волновой функции нулевого приближения Ψ_{0n} . Прямое решение уравнений (22. 2) представляет собой нелегкую, хотя в принципе и выполнимую при наличии малых параметров задачу.

Однако имеется простой путь, позволяющий избежать решения этой задачи в полном объеме и приводящий в ряде случаев к успеху: делаются некоторые простейшие предположения о виде устойчивой функции Ψ_{0n} ; последующая проверка должна показать, насколько эти предположения верны; в случае отрицательного исхода проверки следует выбрать более сложное выражение для Ψ_{0n} и т. д.

Простейшее предположение состоит в том, что разложение функции Ψ_{0n} исчерпывается одним ее первым членом

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{0n}(N+1) &= \int dq_1 \Phi_{0n}(1) \psi_B^+(1) \Psi_0, \\ \Psi_{0n}(N) &= \int dq_1 dq_2 \Phi_{0n}(1, 2) N [\psi_B^+(2) \psi_B(1)] \Psi_0. \end{aligned} \right\} \quad (22.13)$$

При включении корреляционного взаимодействия мы не приходим к стационарному состоянию системы. Однако может оказаться, что мера соответствующей нестационарности будет сравнительно невелика (точное определение этой меры будет дано ниже). Таким образом, мы приходим к приближенному описанию возбужденного состояния системы, причем тем более точному, чем меньше мера нестационарности.

Рассмотрим с указанной точки зрения сначала одночастичное возбужденное состояние системы. Подставляя выражение (22.13) в соотношение (22.11), найдем

$$\Phi_n(1) = \int dq_2 \Phi_{0n}(2) \frac{\langle \Psi_0 | T [\psi_B(1) S] \psi_B^+(2) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}. \quad (22.14)$$

Это выражение можно свести к точной функции Грина, если воспользоваться следующим удобным приемом, который будет применяться и дальше. Учтем, что, как уже указывалось в § 21, волновые функции (22.13) фактически не зависят от временных аргументов. Полагая поэтому в полученном выражении для $\Phi_n(1)$ величину t_2 равной $-\infty$, приходим к выражению для усредняемого оператора

$$T [\psi_B(1) S] \psi_B^+(2) = T [\psi_B(1) \psi_B^+(2) S].$$

Отсюда имеем

$$\Phi_n(1) = i \int dq_2 \lim_{t_2 \rightarrow -\infty} G(1, 2) \Phi_{0n}(2). \quad (22.15)$$

Полученное соотношение имеет силу лишь при использовании приближенного выражения (22.13); учет следующих членов разложения (21.10) привел бы к появлению в выражении (22.15) функций Грина высшего порядка.

Если принять во внимание общее уравнение для функции Грина (19.8), подействовать на выражение (22.14) слева оператором $i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W$ и учесть, что при всех конечных t_1

$$\int dq_2 \lim_{t_2 \rightarrow -\infty} \delta(1-2) \Phi_{0n}(2) = 0,$$

найдем

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) \Phi_n(1) - \int d2 M(1, 2) \Phi_n(2) = 0. \quad (22.16)$$

Функция $G(1, 2)$ является, таким образом, функцией Грина уравнения для величины $\langle \Psi | \psi_B(1) | \Psi_n \rangle$.

Если бы функция Φ_n (1) представляла собой в действительности точное выражение для указанного матричного элемента, то ее зависимость от времени давалась бы соотношением (22.8). Разлагая массовый оператор M в интеграл Фурье по времени

$$M(1, 2) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \exp[-i\varepsilon(t_1 - t_2)] M(q_1, q_2, \varepsilon),$$

мы смогли бы записать выражение (22.16) в виде

$$\begin{aligned} (\Delta E_n - T - W) \Phi_n(q_1) = \\ = \int dq_2 M(q_1, q_2, \Delta E_n) \Phi_n(q_2). \end{aligned} \quad (22.17)$$

Решение этого уравнения с соответствующими граничными условиями приводит к задаче о собственных значениях для энергии возбуждения ΔE_n . Особенно ясно это видно на примере пространственно-однородной системы, для которой указанное уравнение принимает вид

$$\Delta E_n - \varepsilon_{\vec{p}} - M(\vec{p}, \Delta E_n) = 0. \quad (22.18)$$

Этому уравнению должны удовлетворять все допустимые значения ΔE_n , относящиеся как к дискретному, так и к непрерывному спектру.

Необходимо обратить внимание на то, что искомые значения ΔE_n обращают в бесконечность фурье-образ функции Грина $G(\vec{p}, \varepsilon)$:

$$G^{-1}(\vec{p}, \Delta E_n) = 0. \quad (22.19)$$

Мы специально остановимся на этом факте в § 23 и 24.

Так просто обстоит дело, в частности, при полном отсутствии корреляционного взаимодействия; функция (22.13) является точной волновой функцией стационарного состояния системы. Полагая в уравнении (22.18) $M = 0$, получим

$$\Delta E_{0n} = \varepsilon_{\vec{p}},$$

что, очевидно, находится в полном соответствии с результатами раздела 21.2. Величина ΔE_{0n} (как и ΔE_n) зависит от импульса «лишней» частицы \vec{p} , т. е. мы нашли не один уровень возбужденного состояния системы, а целую ветвь. Зависимость ΔE_n от \vec{p} (и от других характеристик состояния) носит название спектра возбуждений в узком смысле этого слова.

Изложенная простая ситуация имеет место лишь в исключительных случаях, когда уравнения (22.17) или (22.18) имеют чисто действительное решение. Как правило, массовый оператор имеет отличную от нуля мнимую часть, и величина ΔE_n оказывается комплексной. Это играет важную роль при выяснении пределов применимости сделанного предположения о структуре функции

Ψ_{0n} . Наличие отличной от нуля мнимой части энергии возбуждения свидетельствует о нестационарном характере полученного в результате учета корреляции состояния (стационарному состоянию отвечает чисто осцилляторное поведение волновой функции системы). Относительная величина мнимой части ΔE_n , точнее говоря, отношение $\frac{\text{Im}\Delta E_n}{\text{Re}\Delta E_n}$ и является мерой нестационарности рассматриваемого состояния.

Прежде чем обосновать утверждение о том, что малость указанного отношения гарантирует правильность найденных значений ΔE_n и $\Phi_n(q_1)$, отметим следующее обстоятельство. Решение уравнения (22. 17) по существу дает не только значения ΔE_n и Φ_n , но и ответ на вопрос о структуре устойчивой волновой функции нулевого приближения. Если задаться произвольной функцией $\Phi_{0n}(q_1)$ в уравнении (22. 15), то определяемая им функция $\Phi_n(1)$ будет произвольно зависеть от времени. В частности, эта функция не совпадает с решениями уравнения (22. 17), описывающего сравнительно узкий класс «квазистационарных» состояний системы, волновая функция которых экспоненциально зависит от времени. Каждому из этих состояний отвечает вполне определенная функция $\Phi_{0n}(q_1)$, которая может быть получена из решения уравнения (22. 17) путем выключения взаимодействия. Полученная таким образом функция $\Phi_{0n}(q_1)$ после подстановки в выражение (22. 13) дает «наиболее устойчивую» волновую функцию из класса функций, содержащих одну лишнюю частицу сверх основного состояния.

Вернемся теперь к сформулированному выше утверждению. Если бы мнимая часть ΔE_n точно равнялась нулю, то суперпозиция устойчивых волновых функций, составляющая функцию $\Phi_{0n}(q_1)$, состояла бы или из одного состояния, или из состояний, остающихся вырожденными и при включении корреляционного взаимодействия. В последнем случае уравнения (22. 2) имеют один кратный корень, а матрица $\sigma_{\alpha\beta}$ пропорциональна единичной. И в том и другом случае выбранная функция Ψ_{0n} по существу является устойчивой. Поэтому малость $\text{Im}\Delta E_n$ является гарантией близости выбранной функции Ψ_{0n} к устойчивой функции нулевого приближения.

22. 5. Аналогичным образом может быть рассмотрена и величина $\Phi_n(1, 2)$, полученная в предположении, что волновая функция нулевого приближения дается соотношением (22. 13). Подстановка в соотношение (22. 11) выражения (22. 13), в котором положено $t_1, t_2 \rightarrow -\infty$, дает

$$\Phi_n(1, 2) = \int dq_3 dq_4 \lim_{t_3, t_4 \rightarrow -\infty} \Phi_{0n}(3, 4) \times \\ \times \frac{\langle \Psi_0 | T [\Psi_B^+(2) \Psi_B(1) S] N [\Psi_B^+(3) \Psi_B(4)] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}.$$

Учитывая определение свертки (§ 9), имеем

$$N [\psi_B^+(3) \psi_B(4)] = T [\psi_B^+(3) \psi_B(4)] + iG_0(4, 3),$$

откуда

$$\Phi_n(1, 2) = \int dq_3 dq_4 \lim_{t_3, t_4 \rightarrow -\infty} \Phi_{0n}(3, 4) \times \\ \times [G_0(4, 3) G(1, 2) - G(1, 4, 2, 3)].$$

Используя соотношения (21.18), имеем окончательно

$$\Phi_n(1, 2) = - \int dq_3 dq_4 \lim_{t_3, t_4 \rightarrow -\infty} G(1, 4, 2, 3) \Phi_{0n}(3, 4). \quad (22. 20)$$

Равенства (22. 15) и (22. 20) очень наглядны, они определяют эволюцию величин $\Phi_n(1)$, $\Phi_n(1, 2)$ от бесконечного прошлого, где корреляция между частицами отсутствовала, к интересующему нас моменту. Функции G при этом проявляют в полной мере свойства, присущие функциям Грина.

Для функции $\Phi_n(1, 2)$, как и для $\Phi_n(1)$, можно составить некоторое интегральное уравнение. Подставляя соотношение (20. 12) в равенство (22. 20), находим

$$\Phi_n(1, 2) = - \int dq_3 dq_4 \lim_{t_3, t_4 \rightarrow -\infty} \left[\tilde{G}(1, 4, 2, 3) + \right. \\ \left. + 4 \int d5 d6 d7 d8 G(1, 5) G(4, 6) \Delta(5, 6, 7, 8) \times \right. \\ \left. \times G(7, 2) G(8, 3) \right] \Phi_{0n}(3, 4). \quad (22. 21)$$

Для упрощения этого уравнения заметим, что комбинацию $\int dq_3 dq_4 G(4, 3) \Phi_{0n}(3, 4)$ можно положить равной нулю в пределе $t_3, t_4 \rightarrow -\infty$. При этом $G(4, 3) \rightarrow G_0(4, 3)$, и соотношение (21. 18) дает нулевой результат.

Введем далее функцию

$$\bar{\Phi}_n(1, 2) = \int dq_3 dq_4 \lim_{t_3, t_4 \rightarrow -\infty} G(1, 3) G(4, 2) \Phi_{0n}(3, 4), \quad (22. 22)$$

которая описывает корреляции частицы и дырки с системой, но не друг с другом. Тогда уравнение (22. 21) принимает вид

$$\Phi_n(1, 2) = \bar{\Phi}_n(1, 2) + \\ + 4 \int d3 d4 d5 d6 G(1, 3) G(5, 2) \Delta(3, 4, 5, 6) \bar{\Phi}_n(6, 4). \quad (22. 21')$$

Это уравнение можно свести к интегральному уравнению для функции Φ_n , которое может служить для нахождения спектра. Для этого следовало бы произвести выделение компактной вершинной части, подобно тому, как это было сделано в применении к парной функции Грина в § 20. Мы проведем конкретное рассмотрение этих вопросов в § 25; здесь же заметим, что соответствующее уравнение для определения ΔE_n также в общем случае имеет комплексные корни.

22. 6. В двух предыдущих разделах мы рассмотрели задачу об определении спектра возбужденных состояний системы в предположении о том, что устойчивые волновые функции нулевого приближения описываются первыми членами разложений (21. 9), (21. 10). При этом выяснилось, что величина энергии возбуждения ΔE_n и матричный элемент Φ_n определяются уравнениями, содержащими соответственно массовый оператор и вершинную часть. Появляющаяся при решении этих уравнений мнимая часть энергии — затухание — имеет при указанной постановке задачи чисто формальный смысл и играет роль меры точности принятого предположения о виде устойчивой волновой функции. Если величина затухания получается сравнимой с ΔE_n , то это свидетельствует о грубости предположения. Выбирая тогда в качестве устойчивой функции Ψ_{0n} , скажем, первые два члена разложений (21. 9), (21. 10), мы приходим к более сложным уравнениям для функций Φ_n , содержащим дополнительно вершинную часть (для одночастичного) и шестиполосник (для парного возбуждения). Решение этих уравнений приведет к меньшему затуханию. При необходимости эту процедуру можно продолжить.

Рассмотренная постановка задачи, цель которой найти стационарные возбужденные состояния системы сами по себе, является далеко не единственно возможной. Важный класс задач теории многих частиц требует ответа на вопрос о результатах перехода системы в возбужденное состояние за счет определенного механизма возбуждения. Другими словами, требуется найти результат эволюции во времени определенным образом созданного возбужденного состояния системы. Сюда же примыкает задача об описании перехода системы в невозбужденное состояние. Имеется в виду, в частности, процесс распада одночастичного возбужденного состояния с испусканием одной частицы. Как будет выяснено ниже, при этом по-прежнему можно пользоваться найденными выше уравнениями, однако их смысл оказывается совершенно иным. В частности, мнимая часть корня этих уравнений имеет прямой физической смысл, характеризуя скорость «исчезновения» первоначального состояния, точнее говоря, скорость убывания со временем вероятности обнаружить это состояние.

Характерная особенность рассматриваемой постановки задачи состоит в том, что вид волновой функции $\Psi_{v_n}(-\infty)$ в данном случае навязан физическими условиями задачи. Существенно, что величина $\Psi_{v_n}(-\infty)$ не совпадает с устойчивой волновой функцией нулевого приближения. Поэтому точная волновая функция возбужденного состояния системы представляет собой суперпозицию волновых функций с различными (но близкими) значениями энергии. Система находится при этом в квазистационарном состоянии, а соответствующий уровень энергии имеет конечную ширину.

22. 7. В качестве примера рассмотрим возбуждение системы (в частности, атомного ядра) налетающей частицей того же сорта, что и частицы системы. Считается, что система первоначально

находилась в основном состоянии. В данном случае нам известна волновая функция системы при $t \rightarrow -\infty$, совпадающая по структуре с первым членом разложения (21. 10):

$$\Psi_{Bn}(-\infty) = \int dq_2 \lim_{t_2 \rightarrow -\infty} \Phi(2) \Psi_B^+(2) \Psi_0, \quad (22. 23)$$

где $\Phi(2)$ — некоторая функция. Дополнительные пары по условию отсутствуют.

Подставим приведенное выражение для $\Psi_{Bn}(-\infty)$ в соотношение (22. 7), которое запишем в виде

$$\Phi_n(1) = \frac{\langle \Psi_0 | T[\Psi_B(1)S] | \Psi_{Bn}(-\infty) \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}.$$

Повторяя рассуждения, приведшие нас к соотношению (22. 15), убеждаемся в том, что оно теперь имеет совершенно точный характер. При этом является точным и уравнение (22. 16):

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W \right) \Phi_n(1) - \int d2 M(1, 2) \Phi_n(2) = 0, \quad (22. 24)$$

которое можно трактовать как эффективное уравнение Шредингера, описывающее состояние попавшей в систему внешней частицы. Делая подстановку $\Phi_n(1) = \Phi_n(q_1) \exp(-i\Delta E_n t_1)$, приходим к уравнению, аналогичному (22. 17):

$$\begin{aligned} & (\Delta E_n - T - W) \Phi_n(q_1) - \\ & - \int dq_2 M(q_1, q_2, \Delta E_n) \Phi_n(q_2) = 0, \end{aligned} \quad (22. 25)$$

которое непосредственно отвечает понятию об оптическом потенциале, широко применяемому в теории ядерных реакций. Оптический потенциал U , равный

$$U\Phi_n(q_1) = W\Phi_n(q_1) + \int dq_2 M(q_1, q_2, \Delta E) \Phi_n(q_2), \quad (22. 26)$$

состоит из двух частей: самосогласованного потенциала W , зависящего от импульса и определяющего общую потенциальную яму, в которой движется частица, а также массового оператора, который имеет нелокальную структуру, зависит от энергии возбуждения и содержит мнимую часть, отвечающую поглощению частицы.

Приведем выражение для мнимой (антиэрмитовой) части оптического потенциала в низшем порядке теории возмущений, используя выражение для собственно энергетической части Σ , совпадающей в этом приближении с M (см. § 14). Соотношение (14. 9) дает:

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_{\mu\nu}(\varepsilon) & \approx -\pi \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \langle \mu \mu_3 | V | \mu_1 \mu_2 \rangle \langle \mu_1 \mu_2 | V(1 - \mathcal{P}) | \nu \mu_3 \rangle, \\ & [(1 - n_{\mu_1})(1 - n_{\mu_2})n_{\mu_3} - n_{\mu_1}n_{\mu_2}(1 - n_{\mu_3})] \times \\ & \times \delta(\varepsilon + \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_1} - \varepsilon_{\mu_2}), \end{aligned}$$

откуда

$$\text{Im } M(q_1, q_2, \Delta E) = \sum_{\mu\nu} \chi_\mu^*(q_2) \chi_\nu(q_1) \text{Im } \sum_{\mu\nu} (\Delta E). \quad (22. 27)$$

Рассмотрение оптического потенциала в тяжелом ядре в рамках модели, отвечающей потенциалу взаимодействия (1. 11), проведено в работе [91]. При этом получено хорошее согласие с опытом в области малых энергий. Понятие об оптическом потенциале и выписанные выше полевые уравнения для его определения могут оказаться полезными и в применении к проблеме рассеяния электронов на атоме, где указанным образом может быть описана, в частности, поляризация внутренних оболочек внешним электроном.

Соотношение (22. 15) дает возможность прямо выразить сечение рассеяния частицы на системе через одночастичную функцию Грина основного состояния системы. С этой целью $\Phi_{0n}(2)$ нужно трактовать как состояние падающей частицы, а $\Phi_n(1)$ при $t_1 \rightarrow +\infty$ — как состояние рассеянной частицы и поступать обычным в теории рассеяния способом [92, 93].

22. 8. Особенно наглядно проявляется мнимая часть энергии возбуждения в задаче о распаде возбужденного состояния системы $N + 1$ частиц с испусканием одной частицы и возвращением остальной системы в основное состояние. В данном случае нам известна волновая функция системы при $t \rightarrow +\infty$, также совпадающая по структуре с первым членом разложения (21. 10):

$$\Psi_{Bn}(+\infty) = \int dq_2 \lim_{t_2 \rightarrow \infty} \Phi(2) \Psi_B^+(2) \Psi_0.$$

Удобнее здесь рассматривать не функцию $\Phi_n(1)$, а ей сопряженную

$$\Phi_n^*(1) = \langle \Psi_n | \Psi_B^+(1) | \Psi \rangle.$$

Подставляя сюда соотношение

$$\Psi_n^* = \Psi_{Bn}^*(\infty) \mathbf{S}(\infty, 0),$$

найдем *

$$\begin{aligned} \Phi_n^*(1) &= \int dq_2 \lim_{t_2 \rightarrow +\infty} \langle \Psi_0 | T [\Psi_B(2) \Psi_B^+(1) \mathbf{S}] | \Psi_0 \rangle = \\ &= i \int dq_2 \lim_{t_2 \rightarrow +\infty} \Phi^*(2) G(2, 1). \end{aligned}$$

Дальнейшее рассмотрение потребует проведения некоторых предварительных выкладок. Покажем, прежде всего, что имеет место уравнение:

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t_2} - T_{q_2} - W_{q_2} \right) G_0(1, 2) = \delta(1 - 2).$$

* Здесь опущен несущественный фазовый множитель $\langle \Psi_0 | \mathbf{S} | \Psi_0 \rangle$.

Для этого нужно учесть уравнение

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t_2} - T_{q_2} - W_{q_2}\right) \Psi_B^+(2) = 0$$

и провести те же рассуждения, что и в § 10, учитывая равенство $W^+ = W$.

Нашей целью является получение аналогичного уравнения для точной функции Грина. Пусть оно имеет вид

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t_2} - X\right) G(1, 2) = \delta(1 - 2),$$

где X — неизвестный оператор. С учетом уравнения Дайсона получим

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t_2} - X\right) G_0(1, 2) + \int d3 G_0(1, 3) M(3, 2) = \delta(1 - 2).$$

Сравнивая это уравнение для G_0 с приведенным выше, находим

$$Xf(2) = (T_{q_2} + W_{q_2})f(2) + \int d3f(3) M(3, 2).$$

Таким образом, окончательно

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t_2} - T - W\right) G(1, 2) - \int d3 G(1, 3) M(3, 2) = \delta(1 - 2).$$

Возвращаясь к полученному выше уравнению для Φ_n^* , найдем

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W\right) \Phi_n^*(1) - \int d2 \Phi_n^*(2) M(2, 1) = 0$$

или, сопрягая это уравнение,

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - T - W\right) \Phi_n(1) - \int d2 M^+(1, 2) \Phi_n(2) = 0.$$

Здесь мы обозначили через $M^+(1, 2)$ величину $M^*(2, 1)$. Отыскивая решение этого уравнения в виде $\Phi_n(1) = \Phi_n(q_1) \times \exp(-i\Delta E_n t_1)$, получим

$$(\Delta E_n - T - W) \Phi_n(q_1) - \int dq_2 M^+(q_1, q_2, \Delta E_n) \Phi_n(q_2) = 0. \quad (22. 28)$$

Это уравнение, имеющее комплексные решения, дает спектр распадающейся системы, а мнимая часть ΔE_n — ширину уровня. Сама величина $\Phi_n(q_1) = \langle \Psi | \psi(q_1) | \Psi_n \rangle$ имеет смысл амплитуды вероятности обнаружить в возбужденном состоянии Ψ_n частицу в точке q_1 и оставшуюся систему в основном состоянии. Другими словами, $\Phi_n(q_1)$ представляет собой амплитуду перехода из состояния Ψ_n в состояние $\psi^+(q_1) \Psi$.

До сих пор мы рассматривали примеры, относящиеся к одночастичному возбужденному состоянию системы. Аналогичным образом обстоит дело и для парных возбуждений. И в этом случае

мнимая часть энергии имеет прямой физический смысл, описывая затухание (распад) возбужденного состояния системы. Оставляя конкретное рассмотрение относящихся сюда вопросов до § 28, отметим здесь лишь следующее. Определить, имеем ли мы дело с квазистационарным или истинно стационарным состоянием системы, проще всего, мысленно выключая корреляционное взаимодействие между частицами. Если возникающее при этом состояние отличается от устойчивого состояния нулевого приближения, то мы заведомо имеем дело с квазистационарным состоянием. Именно так бывает, например, при электромагнитном возбуждении системы с кулоновским взаимодействием. После выключения корреляционного взаимодействия мы получаем состояние, которое является суперпозицией состояний с одной, двумя и т. д. парами. Вклад состояний с n парами определяется величиной $(e^2/\hbar c)^n$. Малость $e^2/\hbar c$ позволяет считать, что практически имеется лишь состояние с одной парой, которое не совпадает с устойчивым состоянием. В последнем вклад состояний с n парами определяется не $(e^2/\hbar c)^n$, а соответствующей степенью эффективной константы взаимодействия между частицами системы.

22. 9. Обратимся теперь к вычислению волновой функции возбужденного состояния системы Ψ_n . В принципе эту величину можно связать с волновой функцией нулевого приближения оператором $S(0, -\infty)$. Однако практическое проведение соответствующих расчетов представляет собой весьма нелегкую задачу. Кроме того, всей информации, заключенной в функции Ψ_n , чаще всего не требуется. Наибольший интерес представляет матрица плотности возбужденного состояния системы $R_n(q_1, q_2)$, дающая распределение одночастичных характеристик в этом состоянии и связанная обычным образом $[R_n(q_1, q_2) = -i \lim_{t_2 \rightarrow t_1 + 0} G_n(1, 2)]$ с одночастичной функцией Грина возбужденного состояния системы

$$G_n(1, 2) = -i \langle \Psi_n | T [\psi_r(1) \psi_r^\dagger(2)] | \Psi_n \rangle. \quad (22. 29)$$

В этой связи возникает вопрос: выражается ли величина $G_n(1, 2)$ через рассмотренные выше матричные элементы Φ_n или ее определение требует решения каких-то новых уравнений. Функция Φ_n , будучи матричным элементом, связывающим функции Ψ_n и Ψ , содержит в себе некоторую информацию, относящуюся к Ψ_n . Вопрос состоит в том, достаточна ли эта информация для описания одночастичных характеристик состояния Ψ_n .

Этот вопрос можно перевести и в другую плоскость. В § 21 мы видели, что величины $\Phi_{0n}(1)$, $\Phi_{0n}(1, 2)$ можно трактовать как волновые функции того комплекса частиц и дырок, появление которого приводит к возбуждению системы. При включении корреляционного взаимодействия величины $\Phi_{0n}(1)$ и $\Phi_{0n}(1, 2)$ переходят соответственно в $\Phi_n(1)$ и $\Phi_n(1, 2)$. Если бы оказалось, что (хотя бы в указанных выше предположениях о виде устойчивой функции Ψ_{0n}) величины $\Phi_n(1)$ и $\Phi_n(1, 2)$ можно по-преж-

нему трактовать как волновые функции некоторого, хотя и более сложного, комплекса, то решение вопроса не составляло бы труда. При этом имели бы силу соотношения (21. 23), (21. 24), а также (21. 21), в которых следовало бы заменить функции Φ_{0n} на Φ_n :

$$R_n(q_1, q_2) - R(q_1, q_2) = \Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1), \quad (22. 30)$$

$$R_n(q_1, q_2) - R(q_1, q_2) = \int dq_3 [\Phi_n^*(q_2, q_3) \Phi_n(q_1, q_3) - \Phi_n^*(q_3, q_1) \Phi_n(q_3, q_2)], \quad (22. 31)$$

$$\int dq_1 |\Phi_n(q_1)|^2 = 1 \quad \int dq_1 dq_2 |\Phi_n(q_1, q_2)|^2 = 1. \quad (22. 32)$$

Перейдем к рассмотрению поставленного вопроса. Учитывая соотношения

$$\Psi_n = S(0, -\infty) \Psi_{0n}, \quad S \Psi_{0n} = \langle \Psi_{0n} | S | \Psi_{0n} \rangle \Psi_{0n},$$

перепишем выражение (22. 29) в виде

$$G_n(1, 2) = -i \frac{\langle \Psi_{0n} | T [\Psi_B^+(1) \Psi_B^+(2) S] | \Psi_{0n} \rangle}{\langle \Psi_{0n} | S | \Psi_{0n} \rangle}. \quad (22. 33)$$

Подставляя сюда выражения для Ψ_{0n} с $t_1 \rightarrow -\infty$ и Ψ_{0n}^* с $t_1 \rightarrow +\infty$, можно привести это соотношение к функциям Грина основного состояния системы:

$$G_n(1, 2) = \frac{i \int dq_3 dq_4 \Phi_{0n}^*(4) G(4, 1, 3, 2) \Phi_{0n}(3)}{i \int dq_3 dq_4 \Phi_{0n}^*(4) G(4, 3) \Phi_{0n}(3)},$$

где $t_3 \rightarrow -\infty$, $t_4 \rightarrow +\infty$. Сразу же можно заметить, что знаменатель фактически равен единице. В самом деле, используя выражение (22. 15), перепишем его в виде

$$\int dq_4 \lim_{t_4 \rightarrow \infty} \Phi_{0n}^*(4) \Phi_n(4).$$

Но при $t_4 \rightarrow \infty$ функция Φ_n переходит в Φ_{0n} (вследствие выключения взаимодействия). Учитывая условие нормировки (21. 21), приходим к искомому результату.

В числителе выражения для $G_n(1, 2)$ заменим функцию Грина ее представлением через вершинную часть (20. 12). При этом можно избавиться от функций Φ_{0n} , заменяя их функциями Φ_n . Для этого можно использовать соотношение (22. 15), а также соотношение

$$\Phi_n^*(1) = -i \int dq_2 \lim_{t_2 \rightarrow \infty} G(2, 1) \Phi_{0n}^*(2),$$

которое можно вывести тем же способом, что и (22. 15). В результате приходим к следующему основному соотношению:

$$G_n(1, 2) - G(1, 2) = -i \Phi_n^*(2) \Phi_n(1) - 4i \int d3 d4 d5 d6 \Phi_n^*(3) G(1, 4) G(6, 2) \Delta(3, 4, 5, 6) \Phi_n(5). \quad (22. 34)$$

Переходя к матрице плотности, получаем ($t_2 - t_1 \rightarrow +0$)

$$R_n(q_1, q_2) - R(q_1, q_2) = \Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1) +$$

$$- 4 \int d3 d4 d5 d6 \Phi_n^*(3) G(1, 4) G(6, 2) \Delta(3, 4, 5, 6) \Phi_n(5). \quad (22. 35)$$

Второй член правой части выражения (22. 35) нарушает соотношение (22. 30). Это обстоятельство имеет простой смысл, поскольку, как уже указывалось в § 20, указанный член описывает рассеяние комплексов друг на друге, препятствующее возможности их независимого существования. В общем случае это рассеяние играет существенную роль; однако в разреженных (нерезонансных) и сжатых системах это рассеяние вносит сравнительно малый вклад. Поэтому для таких систем понятие о волновой функции одночастичного возбуждения может (с соответствующей точностью) оказаться оправданным.

22. 10. Сложнее обстоит дело с парными возбуждениями. Подставляя в общую формулу (22. 33) выражения для Ψ_{0n} с $t_1, t_2 \rightarrow -\infty$ и для Ψ_{0n}^* с $t_1, t_2 \rightarrow +\infty$, находим

$$G_n(1, 2) = \frac{\left\{ \int dq_3 dq_4 dq_5 dq_6 \Phi_{0n}^*(5, 6) \langle \Psi_0 | T [\Psi(5) \Psi_B(1) \times \right.}{\left. \times \Psi_B(4) \Psi_B^+(6) \Psi_B^+(2) \Psi_B^+(3) S \right] | \Psi_0 \rangle \Phi_{0n}(3, 4) \right\}}{\left\{ \int dq_3 dq_4 dq_5 dq_6 \Phi_{0n}^*(5, 6) \langle \Psi_0 | T [\Psi_B(5) \Psi_B(4) \Psi_B^+(3) \times \right.}{\left. \times \Psi_B^+(6) S \right] | \Psi_0 \rangle \Phi_{0n}(3, 4) \right\}}, \quad (22. 36)$$

где $t_5, t_6 \rightarrow \infty, t_3, t_4 \rightarrow -\infty$. Вводя в знаменателе парную функцию Грина и учитывая уравнение (22. 20) и условие нормировки (21. 21), нетрудно убедиться в том, что знаменатель равен единице.

Вводя трехчастичную функцию Грина

$$G(1, 2, 3, 4, 5, 6) = \frac{\langle \Psi_0 | T [\Psi_B(1) \Psi_B(2) \Psi_B(3) \Psi_B^+(6) \Psi_B^+(5) \Psi_B^+(4) S] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | S | \Psi_0 \rangle}, \quad (22. 37)$$

можно написать

$$G_n(1, 2) = -i \int dq_3 dq_4 dq_5 dq_6 \Phi_{0n}^*(5, 6) \times G(5, 1, 4, 3, 2, 6) \Phi_{0n}(3, 4). \quad [(22. 38)$$

Если подставить в выражение (22. 37) разложение S -матрицы по нормальным произведениям, то понадобится дополнительный член этого разложения, содержащий N -произведение шести операторов. Соответствующая функция — шестиполюсник — помимо несвязной части содержит также и связную часть, описывающую взаимные корреляции трех частиц. Малость связной части шестиполюсника является необходимым условием существования волновой функции пары. Это условие во всяком случае выполнено в разреженной системе, где следует учитывать лишь парные корреляции частиц. В сжатых системах тройные корреляции столь же существенны, что и парные, и ими можно пренебречь только тогда, когда вообще корреляции невелики.

Даже в пренебрежении тройными корреляциями соотношение (22. 38) не сводится к выражению (22. 31). Последнее можно было бы получить лишь при условии, что трехчастичная функция

Грина в пренебрежении связным шестипольником представляется суммой интегралов типа

$$\int d7 G(5, 1, 6, 7) G(7, 3, 2, 4).$$

При этом соотношение (22. 20) (и аналогичное соотношение для Φ_n^*) позволило бы заменить в выражении (22. 36) функции Φ_{0n} на Φ_n и получить соотношение (22. 31). Однако все обстоит гораздо сложнее*.

Приведем результаты, относящиеся к сильносжатому электронному газу [94]. В этом случае точная волновая функция возбужденного состояния системы может быть представлена в виде [95]

$$\Psi_n(N) = \int dq_1 dq_2 \Phi_n'(q_1, q_2) N [\Psi^+(q_1) \Psi(q_2)] \Psi,$$

где Φ_n' — некоторая функция, связанная с Φ_n^* соотношением**

$$\Phi_n(q_1, q_2) = \int dq_3 [\Phi_n'(q_1, q_3) R(q_3, q_2) - R(q_1, q_3) \Phi_n'(q_3, q_2)].$$

Матрица плотности и условие нормировки выражаются через обе функции Φ_n и Φ_n' :

$$\begin{aligned} R_n(q_1, q_2) - R(q_1, q_2) &= \int dq_3 [\Phi_n^*(q_2, q_3) \Phi_n'(q_1, q_3) - \\ &\quad - \Phi_n^*(q_3, q_1) \Phi_n'(q_3, q_2)], \\ \int dq_1 dq_2 \Phi_n'(q_1, q_2) \Phi_n^*(q_1, q_2) &= 1. \end{aligned}$$

Таким образом, в данном случае понятие волновой функции комплекса отсутствует. Можно показать, что применение соотношения (22. 31) для описания однородного электронного газа приводит к грубым нарушениям общих теорем типа теоремы вириала. Отсутствие понятия волновой функции пары объясняется при этом сильной поляризацией среды, что делает невозможным описание возбужденного состояния системы с помощью одной функции двух координат. Если бы поляризация вакуума в квантовой электродинамике была значительной, то по той же причине потеряло бы смысл понятие о волновой функции позитрония.

В заключение можно сказать, что вопрос о внутренней структуре рассматриваемого комплекса — о распределении координат, импульсов и т. п. внутри него — представляет собой задачу более сложную, чем задача о нахождении спектра возбуждений. Первая задача требует рассмотрения функций Грина более высокого порядка, чем вторая.

* В случае одночастичного возбуждения число аргументов функции Грина в числителе $G_n(1, 2)$ ровно вдвое превышало число аргументов функции Грина в соотношении (22. 15). Поэтому $G_n(1, 2)$ выражалось в виде произведения двух функций Φ_n . Это чисто арифметическое обстоятельство и отличает одночастичные и парные возбуждения.

** При выключении корреляционного взаимодействия функция Φ_n' совпадает с функцией Φ_n .

Тем более сложным является вопрос о возможности введения волновой функции указанного комплекса. Имеющиеся в литературе утверждения о том, что волновой функцией является Φ_n^* [80], вряд ли можно считать правильными во всех случаях.

§ 23. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА

23. 1. В этом параграфе будет дан вывод важнейшего соотношения метода функций Грина — их спектрального (или параметрического) представления [88, 96] **.

Это представление в аппарате теории играет двоякую роль. С одной стороны, оно позволяет решить до конца задачу о нахождении самих функций Грина. Даже если решена задача о нахождении массового оператора M , функция Грина не определена еще однозначно (см. § 19). Требуется дополнительная информация о том, как понимать функцию G в точках, где ее знаменатель обращается в нуль. Спектральное представление дает соответствующую информацию, или, как говорят, определение правила обхода полюсов функции Грина.

С другой стороны, спектральное представление дает возможность естественным образом ввести и интерпретировать важнейшее понятие современной теории многих взаимодействующих частиц — понятие квазичастицы или элементарного возбуждения, а также найти его основные характеристики: закон дисперсии и затухание.

При выводе спектрального представления фактически не делается никаких предположений о характере системы и законах взаимодействия ее частиц. Несмотря на такую общность подхода, можно специализировать зависимость функции Грина от одной из переменных — энергии. Эта специализация и дается спектральным представлением.

23. 2. Переходим к выводу спектрального представления одночастичной функции Грина G . Запишем ее в виде

$$G(1, 2) = -i \begin{cases} \langle \Psi | \psi_r(1) \psi_r^\dagger(2) | \Psi \rangle & t_1 > t_2 \\ - \langle \Psi | \psi_r^\dagger(2) \psi_r(1) | \Psi \rangle & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (23. 1)$$

Используем правило умножения матриц

$$\langle \Psi_l | ab | \Psi_k \rangle = \sum_l \langle \Psi_l | a | \Psi_l \rangle \langle \Psi_l | b | \Psi_k \rangle,$$

справедливое в случае полноты системы функций Ψ_l ; соответствующее условие имеет вид

$$\sum_l \Psi_l^*(\alpha) \Psi_l(\beta) = \delta_{\alpha\beta},$$

* Функция Φ_n по-прежнему определяет матричный элемент перехода системы в возбужденное состояние при наличии корреляционного взаимодействия.

** В дальнейшем мы следуем в основном работе [88].

где α и β — значения переменных, от которых зависит Ψ_I . Подход, основанный на использовании промежуточной системы функций, был введен в теорию поля Челленом и Леманом [97].

В рассматриваемом случае в качестве промежуточной системы удобно использовать точные собственные функции полного гамильтониана

$$(H - E_n) \Psi_n = 0.$$

Речь идет о собственных функциях всех состояний (основного и возбужденных). Следует ввести в рассмотрение собственные функции, отвечающие любому числу частиц в системе (а не обязательно N), лишь бы эти функции были собственными функциями оператора H . Таким образом, следует использовать все возможные собственные функции H . Полнота этой системы относится к предположениям, лежащим в основе всякого квантовомеханического рассмотрения.

Рассмотрим сначала верхнюю строчку выражения (23. 1). Ее можно записать в виде

$$-i \sum_n \langle \Psi | \Psi_r(1) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi_r^\dagger(2) | \Psi \rangle.$$

В это разложение дают вклад только одночастичные промежуточные состояния Ψ_n . В самом деле, учитывая связь $\Psi_r(1) = S(t_1, 0) \Psi(q_1) S(0, t_1)$, мы видим, что оператор $\Psi_r(1)$ уменьшает число частиц на единицу, поскольку S -матрица содержит равное число операторов рождения и уничтожения и не меняет числа частиц.

Не составляет труда выразить функцию Грина через функции $\Phi_n(1)$ (см. § 22). Именно, при $t_1 > t_2$

$$G(1, 2) = -i \sum_n \Phi_n^*(2) \Phi_n(1).$$

Учитывая зависимость входящих сюда величин от времени, имеем

$$G(1, 2) = -i \sum_n \Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1) \exp[-i \Delta E_n(t_1 - t_2)].$$

Аналогичным образом обстоит дело и при $t_1 < t_2$. Однако в этом случае промежуточные состояния имеют на единицу меньшее число частиц (или лишнюю дырку). Вводя матричный элемент $\tilde{\Phi}_n(1) = \langle \Psi | \Psi_r^\dagger(1) | \Psi_n(N-1) \rangle$, зависимость которого от времени определяется формулой

$$\tilde{\Phi}_n(1) = \tilde{\Phi}_n(q_1) \exp(i \Delta \tilde{E}_n - i t_1),$$

где

$$\Delta \tilde{E}_n = E_n(N-1) - E(N),$$

можем написать окончательно

$$G(1, 2) = -i \sum_n \begin{cases} \Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1) \exp[-i \Delta E_n(t_1 - t_2)] & t_1 > t_2 \\ -\tilde{\Phi}_n^*(q_1) \tilde{\Phi}_n(q_2) \exp[i \Delta \tilde{E}_n(t_1 - t_2)] & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (23. 2)$$

Как и в § 22, величины ΔE_n и $\Delta \tilde{E}_n$ можно выразить через энергию возбуждения системы того же (N) числа частиц, которое имеется в основном состоянии. Обозначая через μ точный химический потенциал системы, имеем

$$\left. \begin{aligned} \Delta E_n &= \Delta E'_n + \mu, \\ \Delta \tilde{E}_n &= \Delta E'_n - \mu. \end{aligned} \right\} \quad (23. 3)$$

Число частиц N предполагается при этом большим.

Переходя к фурье-образу по переменной $t_1 - t_2$, найдем с учетом соотношений приложения В

$$G(q_1, q_2, \varepsilon) = \sum_n \left\{ \frac{\Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1)}{\varepsilon - \Delta E'_n - \mu + i\delta} + \frac{\tilde{\Phi}_n^*(q_1) \tilde{\Phi}_n(q_2)}{\varepsilon + \Delta E'_n - \mu - i\delta} \right\}. \quad (23. 4)$$

23. 3. Проанализируем полученное соотношение. Представим себе, что суммирование по n проходит в два этапа: во-первых, по всем значениям энергии возбуждения $\Delta E'_n$, во-вторых, по всем подсостояниям, отвечающим данному значению $\Delta E'_n$. Практически удобно работать таким образом, как будто спектр энергии непрерывен. Если фактически в системе имеются дискретные уровни, то это автоматически отражается появлением δ -функции от энергии в подынтегральном выражении.

Рассматривая поэтому бесконечно малый интервал энергии возбуждения

$$E < \Delta E'_n < E + dE, \quad (23. 5)$$

мы можем ввести новые функции $A(q_1, q_2, E)$ и $B(q_1, q_2, E)$, определяемые соотношениями

$$\left. \begin{aligned} A(q_1, q_2, E) dE &= \sum_n \Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1), \\ B(q_1, q_2, E) dE &= \sum_n \tilde{\Phi}_n^*(q_1) \tilde{\Phi}_n(q_2), \end{aligned} \right\} \quad (23. 6)$$

где суммирование в правых частях ведется по состояниям, удовлетворяющим условию (23. 5). Функции A и B определяют, таким образом, плотность уровней системы. Их можно записать также в виде

$$\begin{aligned} A(q_1, q_2, E) &= \sum_n \delta(E - \Delta E'_n + \mu) \Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1), \\ B(q_1, q_2, E) &= \sum_n \delta(E - \Delta E'_n - \mu) \tilde{\Phi}_n^*(q_1) \tilde{\Phi}_n(q_2). \end{aligned} \quad (23. 6')$$

Теперь можно перейти от суммирования по n к интегрированию по E , используя общее соотношение, вытекающее из соотношений (23. 5) и (23. 6):

$$\sum_n \Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1) X(\Delta E'_n) \equiv \int dE A(q_1, q_2, E) X(E).$$

Здесь X — произвольная функция. Аналогичное соотношение пишется и для функции B . Таким образом, соотношение (23. 4) можно переписать в виде *

$$G(q_1, q_2, \epsilon) = \int_0^{\infty} dE \left[\frac{A(q_1, q_2, E)}{\epsilon - E - \mu + i\delta} + \frac{B(q_1, q_2, E)}{\epsilon + E - \mu - i\delta} \right]. \quad (23. 7)$$

Полученное соотношение и носит название спектрального представления функции Грина.

Отметим полезное соотношение

$$\int_0^{\infty} dE [A(q_1, q_2, E) + B(q_1, q_2, E)] = \delta(q_1 - q_2). \quad (23. 8)$$

Его левую часть можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \sum_n [\Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1) + \tilde{\Phi}_n^*(q_1) \tilde{\Phi}_n(q_2)] = \\ & = \sum_n [\langle \Psi | \psi(q_1) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi^+(q_2) | \Psi \rangle + \\ & \quad + \langle \Psi | \psi^+(q_2) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi(q_1) | \Psi \rangle]. \end{aligned}$$

Входящую сюда сумму можно вычислить:

$$\langle \Psi | \{ \psi(q_1), \psi^+(q_2) \} | \Psi \rangle = \delta(q_1 - q_2).$$

Соотношение (23. 8) выражает условие полноты системы Ψ_n в его чистом виде.

Рассмотрим вопрос об асимптотике функции Грина при больших значениях ϵ . Умножая спектральную формулу (23. 7) на ϵ и полагая $\epsilon \rightarrow \infty$, найдем

$$\epsilon G(q_1, q_2, \epsilon) \rightarrow \delta(q_1 - q_2). \quad (23. 9)$$

Здесь мы использовали соотношение (23. 8). К тому же пределу стремится и свободная функция Грина $G_0(q_1, q_2, \epsilon)$, что легко видеть из ее выражений (см. § 10). Это обстоятельство имеет вполне ясный физический смысл: частица большой энергии лишь в малой степени реагирует на силы, действующие со стороны других частиц.

Весовые функции A и B нетрудно связать с матрицей плотности основного состояния системы. На основе тех же соображений, которые привели нас к формуле (23. 8), находим

$$R(q_1, q_2) = \int_0^{\infty} dE B(q_1, q_2, E). \quad (23. 10)$$

Интеграл $\int_0^{\infty} dE A(q_1, q_2, E)$ дает соответствующую матрицу плотности, описывающую распределение дырок.

* Величина $E = \Delta E'_n$ всегда положительна, поскольку энергия основного состояния отвечает наимизшему уровню спектра.

23. 4. В пространственно-однородной системе приведенные соотношения несколько упрощаются. В этом случае в число индексов состояния n в соотношениях (23. 6) входит импульс \vec{p} возбужденного состояния системы (в основном состоянии импульс считается равным нулю), причем $\Phi_n(q_1) = a_{n', \vec{p}} \exp(i\vec{p}x_1)$, где $a_{n', \vec{p}}$ — некоторый зависящий от \vec{p} коэффициент. Аналогично $\tilde{\Phi}_n(q_1) = \tilde{a}_{n', \vec{p}} \exp(-i\vec{p}x_1)$. Подставляя эти выражения в соотношения (23. 6) и (23. 7) и вычисляя фурье-образ по разности $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$, найдем

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \int_0^{\infty} dE \left[\frac{A(\vec{p}, E)}{\varepsilon - E - \mu + i\delta} + \frac{B(\vec{p}, E)}{\varepsilon + E - \mu - i\delta} \right], \quad (23. 11)$$

где коэффициент $A(\vec{p}, E)$ пропорционален $\sum_{n'} |a_{n', \vec{p}}|^2$, $B(\vec{p}, E)$ пропорционален $\sum_{n'} |\tilde{a}_{n', \vec{p}}|^2$; суммирование производится в интервале (23. 5) при фиксированном \vec{p} . Отсюда следует положительность величин A и B :

$$A \geq 0, \quad B \geq 0.$$

Выражение для свободной функции Грина (см. § 10)

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = [\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_F)]^{-1} \quad (23. 12)$$

получается из общей спектральной формулы (23. 11) при выборе

$$\left. \begin{aligned} A(\vec{p}, E) &= \delta(E + \mu - \varepsilon_{\vec{p}}), \\ B(\vec{p}, E) &= \delta(E - \mu + \varepsilon_{\vec{p}}). \end{aligned} \right\} \quad (23. 13)$$

Здесь мы положили $\mu = \varepsilon_F$.*

* Это равенство не ограничено случаем идеального газа (см. § 4). Вернемся к неоднородной системе и учтем, что в приближении Хартри — Фока $\Phi_n(q) = \chi_v(q)$, $\Delta E_n = \varepsilon_v$, $\tilde{\Phi}_n(q) = \chi_v^*(q)$, $\Delta E_n = -\varepsilon_v$. Поэтому, согласно соотношению (23. 6'):

$$\begin{aligned} A(q_1, q_2, E) &= \sum_v \delta(E - \varepsilon_v + \mu) \chi_v^*(q_2) \chi_v(q_1), \\ B(q_1, q_2, E) &= \sum_v \delta(E + \varepsilon_v - \mu) \chi_v^*(q_1) \chi_v(q_2). \end{aligned}$$

Подставляя эти выражения в соотношение (23. 7), находим

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon) = \sum_v \chi_v^*(q_2) \chi_v(q_1) [\varepsilon - \varepsilon_v + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_v - \mu)]^{-1}.$$

Сравнивая полученное соотношение с выражением (10. 7), убеждаемся в выполнении равенства химического потенциала и энергии Ферми в приближении Хартри — Фока.

Сравнивая соотношения (23. 11) и (23. 12), можно сказать, что спектральное представление точной функции Грина позволяет интерпретировать ее как функцию совместного распространения свободных частиц (соответственно дырок), имеющих энергию $E + \mu$ (соответственно $-E + \mu$) и представленных с весом A (соответственно B). Тот объект, распространение которого описывает функция G , представляет собой, таким образом, сложную суперпозицию частиц и дырок. При отсутствии взаимодействия (точнее говоря, корреляции) эта суперпозиция сводится в соответствии с соотношением (23. 13) к одному члену.

23. 5. Выше уже упоминалось о том, что спектральная формула дает возможность установить правила обхода особенностей функции Грина и тем самым придать этой величине полную однозначность. Это достигается установлением связи между действительной и мнимой частями функции Грина.

С этой целью рассмотрим симметричную и антисимметричную относительно перестановки q_1 и q_2 части G , A и B , обозначая эти части соответственно индексам «с» и «а». Отметим сразу же, что величины A_c и B_c действительны, а A_a и B_a — чисто мнимы. В самом деле, учитывая определения (23. 6), имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} [\Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1) + \Phi_n^*(q_1) \Phi_n(q_2)] &= 0, \\ \operatorname{Re} [\Phi_n^*(q_2) \Phi_n(q_1) - \Phi_n^*(q_1) \Phi_n(q_2)] &= 0 \end{aligned}$$

и аналогично для функции B . Поэтому мнимая часть симметризованной функции Грина $G_c(q_1, q_2, \varepsilon)$ обязана своим появлением только факторам $\pm i\delta$ в знаменателе. Подобное утверждение относится к действительной части $G_a(q_1, q_2, \varepsilon)$. Учитывая соотношение

$$\operatorname{Im} (a \pm i\delta)^{-1} = \mp i\pi\delta(a),$$

находим:

$$\operatorname{Im} G_c = \pi \int_0^\infty dE \{ -A_c(E) \delta(E - \varepsilon + \mu) + B_c(E) \delta(E + \varepsilon - \mu) \},$$

$$\operatorname{Re} G_a = i\pi \int_0^\infty dE \{ -A_a(E) \delta(E - \varepsilon + \mu) + B_a(E) \delta(E + \varepsilon - \mu) \}.$$

При $\varepsilon > \mu$ в области интегрирования обращается в нуль аргумент первых слагаемых в фигурных скобках; при $\varepsilon < \mu$ эффективно второе слагаемое.

В результате находим:

$$\left. \begin{aligned} A_c(\varepsilon - \mu) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_c(\varepsilon) \\ A_a(\varepsilon - \mu) &= \frac{i}{\pi} \operatorname{Re} G_a(\varepsilon) \end{aligned} \right\} \varepsilon > \mu, \\ \left. \begin{aligned} B_c(-\varepsilon + \mu) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_c(\varepsilon) \\ B_a(-\varepsilon + \mu) &= -\frac{i}{\pi} \operatorname{Re} G_a(\varepsilon) \end{aligned} \right\} \varepsilon < \mu \quad (23. 14)$$

или иначе

$$\left. \begin{aligned} A_c(E) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_c(\mu + E), \\ A_a(E) &= -\frac{i}{\pi} \operatorname{Re} G_a(\mu + E), \\ B_c(E) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_c(\mu - E), \\ B_a(E) &= -\frac{i}{\pi} \operatorname{Re} G_a(\mu - E). \end{aligned} \right\} \quad (23.14')$$

Подставляя эти соотношения в спектральную формулу, находим:

$$G_c(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dE \left\{ \frac{\operatorname{Im} G_c(\mu + E)}{\varepsilon - E - \mu + i\delta} - \frac{\operatorname{Im} G_c(\mu - E)}{\varepsilon + E - \mu - i\delta} \right\},$$

$$G_a(\varepsilon) = \frac{i}{\pi} \int_0^{\infty} dE \left\{ \frac{\operatorname{Re} G_a(\mu + E)}{\varepsilon - E - \mu + i\delta} - \frac{\operatorname{Re} G_a(\mu - E)}{\varepsilon + E - \mu - i\delta} \right\}.$$

Эти соотношения можно записать в более компактной форме, если в первом слагаемом произвести замену $\mu + E \rightarrow E$, во втором слагаемом $\mu - E \rightarrow E$:

$$\left. \begin{aligned} G_c(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\operatorname{sign}(E - \mu) \operatorname{Im} G_c(E)}{\varepsilon - E + i\delta \operatorname{sign}(E - \mu)}, \\ G_a(\varepsilon) &= \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\operatorname{sign}(E - \mu) \operatorname{Re} G_a(E)}{\varepsilon - E + i\delta \operatorname{sign}(E - \mu)}. \end{aligned} \right\} \quad (23.15)$$

Выделяя действительную и мнимую части уравнений (23.15) и учитывая соотношение

$$\operatorname{Re} [a \pm i\delta]^{-1} = P 1/a,$$

найдем окончательно

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{Re} G_c(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\operatorname{sign}(E - \mu) \operatorname{Im} G_c(E)}{\varepsilon - E}, \\ \operatorname{Im} G_a(\varepsilon) &= \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\operatorname{sign}(E - \mu) \operatorname{Re} G_a(E)}{\varepsilon - E}. \end{aligned} \right\} \quad (23.16)$$

Используя соотношение (23.11) и факт действительности A и B , найдем, что в пространственно-однородной системе

$$\operatorname{Re} G(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\operatorname{sign}(E - \mu) \operatorname{Im} G(\vec{p}, E)}{\varepsilon - E}. \quad (23.17)$$

Не составляет труда найти и обратное соотношение, выражающее мнимую часть через действительную. С этой целью докажем соотношение

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon - E)(\varepsilon - E')} = -\pi^2 \delta(E - E'). \quad (23.18)$$

При $E \neq E'$ прямое вычисление дает нулевой результат, при $E = E'$ левая часть соотношения (23.18) обращается в бесконечность. Для нахождения численного коэффициента при δ -функции возьмем интеграл от левой части по $E - E' = \zeta$:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \int_{-N}^N d\zeta \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{1}{\varepsilon(\varepsilon + \zeta)} = \lim_{N \rightarrow \infty} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \ln \left| \frac{N + \varepsilon}{N - \varepsilon} \right|.$$

Делая замену $\varepsilon \rightarrow N\varepsilon$, приходим к интегралу

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \ln \left| \frac{1 + \varepsilon}{1 - \varepsilon} \right| = -\pi^2,$$

что и доказывает соотношение (23.18).

Умножая обе части соотношения (23.17) на $\frac{1}{\varepsilon - E}$, интегрируя по ε и учитывая соотношение (23.18), найдем

$$\text{Im } G(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{sign}(\varepsilon - \mu) P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\text{Re } G(\vec{p}, E)}{\varepsilon - E}. \quad (23.19)$$

Покажем, как восстанавливаются правила обхода с помощью этих соотношений на примере свободной функции Грина. Пусть нам известна действительная часть функции Грина

$$\text{Re } G_0(\vec{p}, \varepsilon) = P \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_p}.$$

Подставляя это выражение в (23.19), найдем

$$\text{Im } G_0(\vec{p}, \varepsilon) = -\pi \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) \text{sign}(\varepsilon_p - \mu).$$

Таким образом, мы вернемся к правильному выражению:

$$G_0(\vec{p}, \varepsilon) = [\varepsilon - \varepsilon_p + i\delta \text{sign}(\varepsilon_p - \varepsilon_F)]^{-1},$$

если учтем, что химический потенциал μ совпадает с ε_F .

Соотношения (23.14) для пространственно-однородной системы можно записать в виде

$$\text{Im } G(\vec{p}, \varepsilon) = \pi \begin{cases} -A(\vec{p}, \varepsilon - \mu) & \varepsilon > \mu \\ B(\vec{p}, \mu - \varepsilon) & \varepsilon < \mu. \end{cases}$$

Функции A и B не только действительны, но и положительны. Поэтому мнимая часть функции Грина меняет знак в точке $\varepsilon = \mu$:

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{Im} G(\vec{\rho}, \varepsilon) < 0 & \quad \varepsilon > \mu, \\ \operatorname{Im} G(\vec{\rho}, \varepsilon) > 0 & \quad \varepsilon < \mu. \end{aligned} \right\} \quad (23. 20)$$

В частности, в самой этой точке, предполагая непрерывность рассматриваемой функции, мы должны положить

$$\operatorname{Im} G(\vec{\rho}, \mu) = 0. \quad (23. 21)$$

23. 6. Сходным образом проводится исследование парной функции Грина (20. 1):

$$G(1, 2, 3, 4) = -\langle \Psi | T [\psi_{\Gamma}(1) \psi_{\Gamma}(2) \psi_{\Gamma}^{\dagger}(4) \psi_{\Gamma}^{\dagger}(3)] | \Psi \rangle.$$

Для наших целей достаточно рассмотреть предел

$$\tilde{G}(1, 2) = \lim G(1, 2, 3, 4),$$

$$4 \rightarrow 1, \quad 3 \rightarrow 2,$$

$$t_4 - t_1 \rightarrow +0,$$

$$t_3 - t_2 \rightarrow +0,$$

равный

$$\langle \Psi | T [\psi_{\Gamma}^{\dagger}(1) \psi_{\Gamma}(1), \psi_{\Gamma}^{\dagger}(2) \psi_{\Gamma}(2)] | \Psi \rangle.$$

Последующие выкладки подобны проведенным в начале этого параграфа; разница состоит в замене операторов $\psi_{\Gamma}(1)$, $\psi_{\Gamma}^{\dagger}(2)$ на комбинации $\psi_{\Gamma}^{\dagger}(1) \psi_{\Gamma}(1)$ и $\psi_{\Gamma}^{\dagger}(2) \psi_{\Gamma}(2)$. Введем, как и выше, полную систему промежуточных состояний Ψ_n ; теперь, однако, эти состояния будут отвечать тому же числу частиц N , что и основное состояние системы. Вводя функцию

$$\Phi_n(q_1, q_2, t) = \Phi_n(q_1, q_2) \exp(-i \Delta E_n t),$$

можем написать *

$$\tilde{G}(1, 2) = \sum_n \begin{cases} \Phi_n^*(q_2, q_2) \Phi_n(q_1, q_1) \exp[-i \Delta E_n(t_1 - t_2)] & t_1 > t_2 \\ \Phi_n^*(q_1, q_1) \Phi_n(q_2, q_2) \exp[i \Delta E_n(t_1 - t_2)] & t_1 < t_2. \end{cases}$$

Вводя фурье-образ \tilde{G} по $t_1 - t_2$, будем иметь

$$\tilde{G}(q_1, q_2, \varepsilon) = \sum_n \left[\frac{\Phi_n^*(q_2, q_2) \Phi_n(q_1, q_1)}{\varepsilon - \Delta E_n + i\delta} - \frac{\Phi_n^*(q_1, q_1) \Phi_n(q_2, q_2)}{\varepsilon + \Delta E_n - i\delta} \right].$$

* В приводимой формуле стоит знак (+) перед второй строчкой, поскольку переставляются пары операторов.

Переходя от суммирования к интегрированию, найдем

$$\tilde{G}(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \varepsilon) = \int_0^{\infty} dE \left[\frac{A(\vec{q}_1, \vec{q}_2, E)}{\varepsilon - E + i\delta} - \frac{A(\vec{q}_2, \vec{q}_1, E)}{\varepsilon - E - i\delta} \right], \quad (23. 22)$$

где

$$A(\vec{q}_1, \vec{q}_2, E) = \sum_n \delta(E - \Delta E_n) \Phi_n^*(\vec{q}_2, \vec{q}_2) \Phi_n(\vec{q}_1, \vec{q}_1). \quad (23. 23)$$

В случае пространственно-однородной системы $\Phi_n(\vec{q}_1, \vec{q}_1) = a_{n' \vec{p}} \exp(i\vec{p}x_1)$, где \vec{p} — суммарный импульс возбужденного состояния, n' — прочие индексы состояния. Тогда

$$\Phi_n^*(\vec{q}_2, \vec{q}_2) \Phi_n(\vec{q}_1, \vec{q}_1) = |a_{n' \vec{p}}|^2 \exp[i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)],$$

$$\Phi_n^*(\vec{q}_1, \vec{q}_1) \Phi_n(\vec{q}_2, \vec{q}_2) = |a_{n', -\vec{p}}|^2 \exp[-i\vec{p}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)].$$

Можно показать, что $a_{n' \vec{p}}^* = a_{n', -\vec{p}}$ и, следовательно, $|a_{n' \vec{p}}|^2 = |a_{n', -\vec{p}}|^2$. Действительно, в рассматриваемом случае в матричный элемент Φ_n дает вклад лишь часть оператора $\Psi^+(\vec{q}_1)\Psi(\vec{q}_1)$, отвечающая импульсу \vec{p} , именно $\int d\vec{x}_1 \exp(-i\vec{p}x_1) \Psi^+(\vec{q}_1)\Psi(\vec{q}_1) \equiv O_{\vec{p}}$. Ввиду эрмитового характера оператора $\Psi^+\Psi$ имеем $O_{\vec{p}}^* = O_{-\vec{p}}$, откуда и следует наше утверждение. Таким образом,

$$\tilde{G}(\vec{p}, \varepsilon) = \int_0^{\infty} dE^2 \frac{A(\vec{p}, E)}{\varepsilon^2 - E^2 + i\delta}, \quad (23. 24)$$

где $A(\vec{p}, E)$ — действительная положительная величина.

Непосредственно видно, что $A = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \tilde{G}$. Отсюда

$$\text{Re} \tilde{G}(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{P} \int_0^{\infty} \frac{dE^2 \text{Im} \tilde{G}(\vec{p}, E)}{\varepsilon^2 - E^2}. \quad (23. 24')$$

23. 7. До сих пор переменные ε и E были действительными величинами. Для выявления аналитических свойств функции Грина в полном объеме необходимо рассмотреть и комплексные значения этих величин, т. е. аналитически продолжить функцию Грина в комплексную плоскость энергии.

Преобразуем формулу (23. 11): делая во втором слагаемом замену $E \rightarrow -E$ и вводя обозначение

$$F(\vec{p}, E) = \begin{cases} A(\vec{p}, E) & E > 0 \\ B(\vec{p}, -E) & E < 0, \end{cases}$$

получим

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{F(\vec{p}, E)}{\varepsilon - \mu - E + i\delta \operatorname{sign}(E)}. \quad (23.25)$$

Введем новую комплексную переменную

$$\zeta = E - i\delta \operatorname{sign}(E).$$

При $E > 0$ $\zeta = E - i\delta$, при $E < 0$ $\zeta = E + i\delta$.

В комплексной плоскости ζ контур интегрирования C , отвечающий действительной оси для переменной E , примет вид, изображенный на рис. 47. Для пояснения заметим, что при $\operatorname{Re}\zeta = E > 0$ (в правой полуплоскости) мы должны взять $\zeta = \tilde{E} - i\delta$, т. е. сместить вниз действительную ось интегрирования на отрезок δ . Так же обстоит дело и в левой полуплоскости.

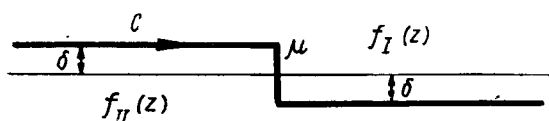


Рис. 47

Помимо комплексной переменной интегрирования введем также и комплексные значения величины $\varepsilon - \mu$, которые обозначим через z . Общая комплексная плоскость величин ζ и z изображена на рис. 47. Подставляя в соотношение (23.25) введенные новые переменные и обозначая через $\tilde{F}(\zeta)$ величину $* F[\zeta + i\delta \operatorname{sign}(\operatorname{Re}\zeta)]$, приходим к основной формуле:

$$G(\vec{p}, z) = \int_C \frac{d\zeta \tilde{F}(\vec{p}, \zeta)}{z - \zeta}. \quad (23.26)$$

Полученное соотношение имеет вид хорошо известного интеграла типа Коши [98], определяющего две различных аналитических функции по обе стороны контура. Обозначим через $f_I(z)$ и $f_{II}(z)$ функции соответственно в верхней и нижней полуплоскостях (см. рис. 47). На самом контуре интегрирования возможны особенности, в том числе точки ветвления.

Выясним связь функции комплексного переменного $G(z)$ с функцией Грина $G(\varepsilon)$. Поскольку луч $\varepsilon > \mu$ лежит выше, а луч $\varepsilon < \mu$ — ниже контура интегрирования, мы можем написать

$$G(\varepsilon) = \begin{cases} f_I(z) |_{z \rightarrow \varepsilon - \mu > 0} \\ f_{II}(z) |_{z \rightarrow \varepsilon - \mu < 0}. \end{cases} \quad (23.27)$$

* На контуре интегрирования величина $\tilde{F}(\zeta)$ действительна и положительна. Заметим, что $\operatorname{Re}\zeta = E$ и потому

$$E = \zeta + i\delta \operatorname{sign} E = \zeta + i\delta \operatorname{sign}(\operatorname{Re}\zeta).$$

В самой точке $\epsilon = \mu$ функция $G(\epsilon)$ может (и должна) иметь особенность.

Различие функций f_I и f_{II} проявляется в том, что при стремлении их аргументов к какой-либо точке контура получаются значения, комплексно сопряженные друг с другом. Рассмотрим, например, две точки $z_1 = -a$, $z_2 = -a + 2i\delta$ (рис. 48). Имеем

$$G(z_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{F(E)}{-a - E - i\delta}, \quad G(z_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{F(E)}{-a - E + i\delta}.$$

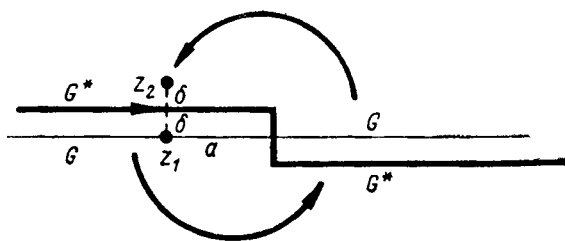


Рис. 48

Учитывая действительность функции $F(E)$, получаем $G(z_2) = G^*(z_1)$ или

$$\lim_{z_2 \rightarrow z_1} f_{II}(z_2) = f_I^*(z_1).$$

Таким образом, если возьмем функцию Грина $G(\epsilon)$ при $\epsilon > \mu$ и аналитически продолжим ее в верхнюю полуплоскость, то придем к функции $f_I(z)$. Если, далее, подойти к контуру C в области $\epsilon < \mu$ сверху, то получится функция $G^*(\epsilon)$. Обратно, если продолжить $G(\epsilon)$ при $\epsilon < \mu$ в нижнюю полуплоскость и подойти к контуру C снизу при $\epsilon > \mu$, то также получится $G^*(\epsilon)$.

Если же продолжить функцию Грина $G(\epsilon)$ при $\epsilon > \mu$ в нижнюю полуплоскость, то получится функция, не имеющая ничего общего с $f_{II}(\epsilon)$ и, в частности, не аналитическая в этой области. Она обязательно должна иметь особенности, поскольку не существует всюду аналитической функции, отличной от нуля и убывающей на бесконечности*. Аналогично аналитическое продолжение функции $G(\epsilon)$ при $\epsilon < \mu$ в верхнюю полуплоскость также приводит к функции, обладающей особенностями. И те, и другие особенности имеют прямой физический смысл.

Для отыскания этих особенностей можно аналитически продолжать как функцию G , так и $\text{Im}G$ (т. е. при $\epsilon > \mu$ — величину A , при $\epsilon < \mu$ — величину B). Это связано с тем, что продолжение функции G^* в указанные области приводит к аналитической функ-

* Последнее свойство вытекает из асимптотических условий (23. 9).

ции (f_I и f_{II}). Поэтому функции G и $\text{Im } G = \frac{G - G^*}{2i}$ имеют в этих областях одинаковые особенности.

Таким образом, в каждой полуплоскости комплексной переменной z имеется две различных функции $G(\vec{p}, z)$. Одна получается аналитическим продолжением функции $G(\vec{p}, \epsilon)$, другая определяется непосредственно спектральной формулой.

Вполне аналогичные высказывания можно сделать и в отношении парной функции Грина. Единственное отличие состоит в том, что при этом химический потенциал μ следует положить равным нулю (в выкладках фигурируют только состояния с одинаковым числом частиц).

23. 8. Вернемся к представлению (23. 11) и подробно рассмотрим первое его слагаемое, отвечающее распространению частицы,

$$G(\vec{p}, \epsilon) = \int_0^{\infty} dE \frac{A(\vec{p}, E)}{\epsilon - \mu - E + i\delta}. \quad (23. 28)$$

Как уже отмечалось, при отсутствии корреляционного взаимодействия функция A принимает вид

$$A(\vec{p}, E) = \delta(E + \mu - \epsilon_{\vec{p}}),$$

т. е. из всей суперпозиции выделяется лишь один член. При учете корреляционного взаимодействия величина A не сводится к δ -функции, она отлична от нуля при всех значениях E . Однако может оказаться, что функция $A(\vec{p}, E)$ имеет более или менее резкий максимум около точки $E = E_{\vec{p}} - \mu$ с шириной $\Gamma_{\vec{p}} \ll E_{\vec{p}}$.

С формальной точки зрения наличие у какой-либо функции резонансного поведения означает, что аналитическое продолжение этой функции в комплексную плоскость ее аргумента выявляет полюс, лежащий близко к действительной оси.

В этом можно убедиться непосредственно. Пусть аналитическое продолжение функции $G(\vec{p}, E)$ в нижнюю полуплоскость приводит к появлению полюса в точке $E_{\vec{p}} - \mu - i\Gamma_{\vec{p}}$. Тогда в окрестности полюса можно положить

$$G = \frac{Z_{\vec{p}}}{E - E_{\vec{p}} + \mu + i\Gamma_{\vec{p}}}$$

и

$$A(\vec{p}, E) \sim \text{Im } G(\vec{p}, E) \sim \frac{Z_{\vec{p}}\Gamma_{\vec{p}}}{(E - E_{\vec{p}} + \mu)^2 + \Gamma_{\vec{p}}^2}, \quad (23. 29)$$

где $Z_{\vec{p}}$ — некоторая не зависящая от E величина. Это выражение справедливо при малых Γ и на самой действительной оси.

Рассмотрим далее, какой зависимости функции Грина от разности времен $t_1 - t_2$ соответствует рассмотренная ситуация. Нужно, очевидно, исследовать выражение

$$G(\vec{p}, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\vec{p}, \varepsilon) \exp(-i\varepsilon\tau) - -i \int_0^{\infty} dEA(\vec{p}, E) \exp[-i(\mu + E - i\delta)\tau], \quad (23.30)$$

где $\tau = (t_1 - t_2) > 0$.

Здесь мы замкнули контур в нижней полуплоскости (см. приложение В).

Подставляя сюда выражение для A , отвечающее отсутствию корреляции, получаем

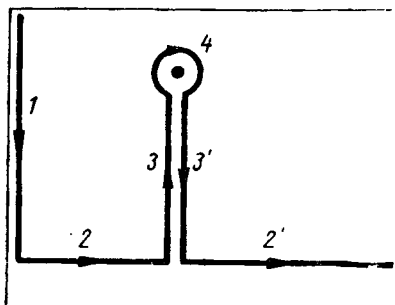


Рис. 49

$$G(\vec{p}, \tau) \sim \exp(-i\varepsilon_{\vec{p}}\tau), \quad (23.31)$$

что отвечает смыслу G как амплитуды перехода системы $N + 1$ частиц из состояния в момент t_2 в состояние в момент t_1 (см. § 10).

Рассматривая общий случай, предположим для простоты, что мы имеем дело лишь с одним полюсом, и сместим контур интегрирования способом, указанным на рис. 49. Интегралы по участкам 3 и 3' взаимно компенсируются (особенность является полюсом), интеграл вокруг полюса дает после подстановки выражения (24.29) вклад

$$G_4(\vec{p}, \tau) = Z_{\vec{p}} \exp(-iE_{\vec{p}}\tau - \Gamma_{\vec{p}}\tau). \quad (23.32)$$

Остается оценить вклады участков 2, 2' и 1. Интеграл по линии 2, 2', которой отвечает $E = E' - iz$, где z — расстояние между действительной осью и рассматриваемой линией, может быть записан в виде

$$G_{2, 2'}(\vec{p}, \tau) = \int_0^{\infty} dE' \exp[-i(\mu + E')\tau - z\tau] A(\vec{p}E').$$

Выбором достаточно большого значения z этот интеграл может быть сделан сколь угодно малым.

Что же касается участка 1, то там $E = ix$ (x меняется от 0 до $-\infty$), поэтому можно написать

$$G_1(\vec{p}, \tau) \sim \int_{-\infty}^0 dx \exp(-i\mu\tau + x\tau) \frac{\Gamma_{\vec{p}}}{(ix - E_{\vec{p}} + \mu)^2 + \Gamma_{\vec{p}}^2}.$$

Наиболее важный вклад в этот интеграл дают значения x , удовлетворяющие неравенству

$$|x| \lesssim \frac{1}{\tau} < \Gamma \ll E_{\vec{p}} - \mu.$$

Отсюда

$$G_1(\vec{p}, \tau) \sim \left(\frac{\Gamma_{\vec{p}}}{E_{\vec{p}} - \mu} \right)^2 \frac{1}{\Gamma_{\vec{p}} \tau}.$$

Эта величина при не слишком малых $\exp(-\Gamma_{\vec{p}}\tau)$ мала по сравнению с выражением (23.32), что позволяет положить $G(\vec{p}, \tau) = G_4(\vec{p}, \tau)$.

Такой результат может быть истолкован следующим образом. В принятых предположениях функция $A(\vec{p}, E)$ имеет узкий максимум. Это означает, что описываемое функцией Грина распространение частицы с учетом ее взаимодействий с системой может быть заменено распространением волнового пакета, составленного из свободных частиц, причем весовая функция, определяющая вклад каждой из частиц, равна $A(\vec{p}, E)$. Такой волновой пакет движется по необходимости нестационарным образом и затухает во времени, причем тем сильнее, чем больше присущий ему разброс энергии.

23. 9. Спектральные представления можно написать не только для функции Грина, но и для других связанных с ней величин, в частности для массового оператора [99].

Будем исходить из соотношения

$$G^{-1}(\vec{p}, \varepsilon) = \varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}} - M(\vec{p}, \varepsilon).$$

Переходя в комплексную плоскость $z = \varepsilon - \mu$, рассмотрим функцию

$$G^{-1}(\vec{p}, z) = z - (\varepsilon_{\vec{p}} - \mu) - M(\vec{p}, z + \mu),$$

равную $\frac{1}{I_1(z)}$ и $\frac{1}{I_2(z)}$ выше и ниже контура C соответственно (см. рис. 47). Выясним аналитические свойства функции G^{-1} . Прежде всего несомненно, что функции G^{-1} и G имеют общие особенности, расположенные на контуре C ; вне этого контура функция $G(\vec{p}, z)$ особенностей не имеет и убывает по мере удаления от начала координат как $|z|^{-1}$.

Выясним, может ли функция G обладать нулями в этой области, т. е. имеются ли там полюса функции $G^{-1}(\vec{p}, z)$. Для этого рассмотрим спектральное представление (23. 25), где функция $F(\vec{p}, E)$ действительна и положительна. Продолжая его в комплексную плоскость, можем написать

$$G(\vec{p}, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{F(\vec{p}, E)}{z - E + i\delta \operatorname{sign} E}.$$

В комплексной плоскости z при $z = a + ib$ мнимая часть $G(\vec{p}, z)$, равная

$$\operatorname{Im} G(\vec{p}, z) = -b \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{F(\vec{p}, E)}{(a - E)^2 + b^2},$$

отлична от нуля. Поэтому ясно, что функция $G^{-1}(\vec{p}, z)$ не имеет особенностей вне контура C . Не будет иметь особенностей также и массовый оператор $M(\vec{p}, z + \mu)$.

При больших значениях ε массовый оператор может вычисляться в низшем порядке теории возмущений, и, как видно из результатов § 14, он стремится к нулю при $\varepsilon \rightarrow \infty$ как ε^{-1} .

Рассмотрим интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{M(\vec{p}, E + \mu)}{\varepsilon - \mu - E + i\delta \operatorname{sign}(E)} = \int_C d\zeta \frac{M(\vec{p}, \zeta + \mu + i\delta \operatorname{sign} \operatorname{Re} \zeta)}{z - \zeta}.$$

Замыкая его по большой дуге в верхней (при $\varepsilon > \mu$) или в нижней (при $\varepsilon < \mu$) полуплоскости, что возможно ввиду убывания M , и учитывая аналитичность подынтегрального выражения, приходим к следующим результатам. Полученный контурный интеграл сводится к вычету в точке $E = \varepsilon - \mu + i\delta$ (при $\varepsilon > \mu$) или $E = \varepsilon - \mu - i\delta$ (при $\varepsilon < \mu$)

$$I = -2\pi i \operatorname{sign}(\varepsilon - \mu) M(\vec{p}, \varepsilon).$$

Сравнивая мнимые части обоих выражений для I , получаем окончательно

$$\operatorname{Re} M(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{\operatorname{sign}(\varepsilon - \mu)}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\operatorname{Im} M(\vec{p}, E)}{\varepsilon - E}. \quad (23. 33)$$

Величина $\operatorname{Im} M = \operatorname{Im} G^{-1} = \frac{-\operatorname{Im} G}{|G|^2}$ меняет знак в точке $\varepsilon = \mu$. Если ввести знакопостоянную (положительную) величину

$$\operatorname{Im} \mathfrak{M}(\vec{p}, \varepsilon) = \operatorname{sign}(\varepsilon - \mu) \operatorname{Im} M(\vec{p}, \varepsilon),$$

где $\mathfrak{M}(\vec{p}, \varepsilon) = \text{sign}(\varepsilon - \mu) M(\vec{p}, \varepsilon)$, то соотношение (23. 33) примет тот же вид, что и спектральное представление самой функции Грина

$$\text{Re } \mathfrak{M}(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\text{sign}(E - \mu) \text{Im } \mathfrak{M}(\vec{p}, E)}{\varepsilon - E}. \quad (23. 34)$$

В ряде случаев использование этого соотношения очень удобно. Обычно сделать прямое вычисление мнимой части массового оператора проще, чем действительной, поскольку δ -функция, стоящая в $\text{Im } M$, сокращает число переменных интегрирования. А по известной мнимой части с помощью выражения (23. 34) нетрудно восстановить и действительную.

§ 24. КВАЗИЧАСТИЦЫ

24. 1. В предыдущих параграфах этой главы уже нередко упоминалось о комплексах, появление которых приводит к возбуждению системы, о волновых пакетах, имитирующих распространение частицы, коррелированной с системой, и т. п. В этом параграфе будет введена некоторая общая точка зрения на этот круг вопросов, связанная с понятием квазичастицы (в широком смысле этого термина).

Начнем с рассмотрения спектральной формулы для одночастичной функции Грина. Допустим, что аналитическое продолжение функции Грина в нижнюю полуплоскость при $\varepsilon > \mu$ привело к полюсу в точке $E_{\vec{p}} - i\Gamma_{\vec{p}}$. (Для простоты мы рассматриваем случай пространственно-однородной системы.) Тогда точную функцию Грина $G(\vec{p}, \varepsilon)$ можно представить в виде

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{Z_{\vec{p}}}{\varepsilon - E_{\vec{p}} + i\Gamma_{\vec{p}}} + \varphi(\vec{p}, \varepsilon), \quad (24. 1)$$

где мы выделили в явной форме особенность этой функции. Здесь $Z_{\vec{p}}$ — некоторый нормировочный множитель, $\varphi(\vec{p}, \varepsilon)$ — функция, регулярная в точке $\varepsilon = E_{\vec{p}} - i\Gamma_{\vec{p}}$.

Мы видим, таким образом, что в области значений ε , близких к $E_{\vec{p}}$, и в области значений \vec{p} , для которых $\Gamma_{\vec{p}} \ll E_{\vec{p}}$, точное выражение для функции Грина $G(\vec{p}, \varepsilon)$ сводится к первому члену выражения (24. 1) и с точностью до множителя $Z_{\vec{p}}$ может быть представлено в виде

$$G(\vec{p}, \varepsilon) \approx (\varepsilon - E_{\vec{p}} + i\Gamma_{\vec{p}})^{-1}. \quad (24. 2)$$

Это соотношение позволяет заключить, что в рассматриваемой области система взаимодействующих частиц, коррелированных друг с другом произвольным образом, в известном смысле эквивалентна системе некоторых других объектов, закон дисперсии которых E_{ρ} отличается от закона дисперсии истинных частиц ϵ_{ρ} и корреляция между которыми отсутствует. Другими словами, при выполнении всех перечисленных условий систему взаимодействующих частиц можно заменить системой, которую допустимо рассматривать одночастичным образом.

В самом деле, если Γ_{ρ} действительно мало, то правая часть соотношения (24. 2) не отличается от выражения для функции Грина системы в приближении Хартри — Фока [см. выражение (10. 8)]. Эта функция содержит бесконечно малую мнимую добавку в знаменателе; поэтому малость величины Γ_{ρ} является условием справедливости обсуждаемого заключения*.

Сравнивая выражения (24. 2) и (10. 8), мы видим, что величина E_{ρ} заменяет собой ϵ_{ρ} — закон дисперсии частицы в приближении Хартри — Фока. Поэтому E_{ρ} можно интерпретировать как закон дисперсии того объекта, введение которого позволяет избавиться от рассмотрения корреляционных взаимодействий.

Этот объект и носит название квазичастицы в узком смысле этого слова. Приведенное выше заключение можно переформулировать теперь таким образом: систему многих взаимодействующих частиц можно заменить идеальным газом квазичастиц**. Эта замена возможна далеко не всегда: она ограничена малостью Γ_{ρ} и близостью ϵ к E_{ρ} . Следовательно, при нарушении этих условий теряет свой смысл и понятие квазичастицы.

Приведем пример системы, для которой понятие о квазичастице очень наглядно. Рассмотрим обычный классический разреженный газ, состоящий из нейтральных атомов. Наша система состоит в конечном счете из ядер и электронов, взаимодействие (и корреляция) между которыми весьма велико. В данном случае чрезвычайно просто найти тот объект (квазичастицу), переходом к которому обеспечивается возможность рассматривать систему как идеальный газ. Квазичастицей здесь является просто отдельный атом.

В рассмотренном примере квазичастица представляет собой комплекс, образованный из малого числа определенных частиц

* Величина $i\delta \operatorname{sign}(\epsilon_{\rho} - \epsilon_F)$ в выражении (10. 8) меняет знак на границе Ферми. Аналогичным свойством обладает и Γ_{ρ} (см. раздел 24. 3).

** Разница между идеальным газом и системой, где корреляция не учитывается, здесь не существенна. Отметим, что при выключении корреляционного взаимодействия квазичастица переходит в обычную частицу.

системы. Этот комплекс в процессе эволюции системы не разрушается. В общем случае квазичастице нельзя поставить в соответствие какие-либо определенные частицы системы. Квазичастица комплектуется из всех частиц системы; даже если в данный момент в ее состав входит только часть частиц, в следующие моменты они заменяются другими частицами системы. Квазичастица, как говорят, представляет собой коллективное образование.

Сведение системы к газу квазичастиц позволяет чрезвычайно упростить ее рассмотрение. Мы получаем возможность говорить на привычном физическом языке и использовать те понятия и представления, которые ранее можно было применять только к системам со слабым взаимодействием. В сущности говоря, переход к представлению о квазичастицах означает дальнейшее развитие той общей линии, которой мы следовали в первых главах книги и которая состоит в стремлении по возможности сохранить одночастичный характер системы путем подходящего подбора характеристик частиц. Переход к приближению Хартри — Фока был первым шагом в этом направлении: изменив закон дисперсии частиц и введя дополнительное внешнее поле, мы исключили из рассмотрения самосогласованную часть взаимодействия между частицами. Введение понятия квазичастицы означает следующий шаг в том же направлении. Однако исключить корреляционное взаимодействие можно только при выполнении весьма жестких условий, обеспечивающих малость затухания.

При нарушении этих условий понятие о квазичастицах можно использовать для построения удобного нулевого приближения. В следующих приближениях нужно ввести взаимодействие между квазичастицами, которое заведомо меньше взаимодействия между истинными частицами.

24. 2. Чрезвычайно существенно, что и возбужденные состояния системы можно при определенных условиях трактовать на языке квазичастиц. Можно говорить, что переход системы в возбужденное состояние произошел благодаря появлению в ней дополнительных не взаимодействующих друг с другом квазичастиц. Эти квазичастицы могут совпадать по своей природе с теми, из которых «построена» сама система, но могут и отличаться от них.

Возможность использования такой картины наталкивается на те же ограничения, что были описаны в предыдущем разделе. Эти условия выполнены при рассмотрении системы, энергия возбуждения которой мала.

Рассматривая для простоты возбужденные состояния системы $N + 1$ частиц, мы видим, что при выполнении указанных условий функция $A(\vec{p}, E)$ имеет резкий максимум около точки $E_p^{\rightarrow} - \mu$. Вместе с тем функция $A(\vec{p}, E)$ играет роль плотности уровней системы в окрестности точки $E = \Delta'E_n = \Delta E_n - \mu$. Таким образом, энергия возбуждения системы действительно

совпадает с величиной E_p^{\rightarrow} , т. е. само возбуждение системы связано рождению одной квазичастицы.

Аналогичная ситуация наблюдается и в системе N частиц. Однако в этом случае имеется двойкая возможность возбуждения системы и, следовательно, два различных типа спектра возбуждений [4]. Существуют квазичастицы, которые способны рождаться поодиночке. Такие квазичастицы по необходимости имеют целочисленный момент количества движения и должны считаться бозе-частицами. Им соответствует спектр возбуждений бозевского типа. Примерами таких возбуждений могут служить фононы, экситоны, плазмоны, кванты спиновых волн [39, 100—102].

Возможен также случай, когда возбуждения рождаются обязательно попарно, причем импульс одного из них выше, другого ниже некоторой величины p_0 — эффективной границы Ферми квазичастиц. Отвечающий им фермиевский спектр возбуждений в качественном отношении напоминает спектр возбуждений идеального газа, а сами возбуждения совпадают с квазичастицей и «квазидыркой»*, появление которых приводит к возбуждению системы $N \pm 1$ частиц. С этой точки зрения бозевские возбуждения можно трактовать как связанные состояния квазичастицы и квазидырки.

Спектр возбуждений реальной системы многих частиц в общем случае содержит как фермиевскую, так и бозевскую ветви, причем последняя может сама состоять из нескольких ветвей (фононная, экситонная и другие ветви твердого тела).

24. 3. Малость (в определенных пределах) корреляционного взаимодействия между квазичастицами позволяет поставить вопрос об индивидуальных характеристиках квазичастицы и в первую очередь о ее энергии. Будем для определенности говорить о собственно квазичастице — одночастичном элементарном возбуждении системы.

В двух предыдущих параграфах мы уже по существу подошли к ответу на вопрос об энергии квазичастицы с двух разных точек зрения. В § 22 было выяснено, что в предположении о малости затухания энергию возбуждения системы ΔE_n можно искать из уравнения

$$\Delta E_n - \varepsilon_p^{\rightarrow} - M(p, \Delta E_n) = 0. \quad (24. 3)$$

Решение этого уравнения имеет мнимую часть, что соответствует затухающему поведению функции Φ_n

$$\Phi_n \sim \exp[-i(E_p^{\rightarrow} - i\Gamma_p^{\rightarrow})t], \quad (24. 4)$$

* «Квазидыркой» мы называем объект, характеристики которого определяются полюсом функции Грина при $\varepsilon < \mu$ и который при выключении корреляционного взаимодействия переходит в обычную дырку. К фермиевскому типу относится электронный спектр в металлах [103], поляронный спектр ионного кристалла [104] и др.

где $E_p^{\rightarrow} - i\Gamma_p^{\rightarrow} = \Delta E_n$ — корень уравнения (24. 3). Появление отличного от нуля затухания объясняется тем, что мы написали приближенное уравнение для функции Φ_n , сделав определенные предположения о виде устойчивой волновой функции нулевого приближения. На самом деле выбранная волновая функция не вполне устойчива, а является суперпозицией нескольких устойчивых функций, каждая из которых приобретает за счет корреляционного взаимодействия свое значение энергии; это и приводит к появлению видимой нестационарности состояния системы. Если реальным условиям соответствует именно неустойчивая волновая функция, то выражение (24. 4) описывает реальное затухание данного начального состояния системы.

Теперь можно ответить на часто возникающий вопрос о том, почему матричный элемент Φ_n , полученный решением уравнения (24. 3), затухает во времени, в то время как при выводе спектральной формулы используется выражение для Φ_n , не содержащее никакого затухания. Дело в том, что в последнем случае используется точное выражение для Φ_n , отвечающее истинному стационарному состоянию системы; уравнение же для функции Φ_n , содержащее только массовый оператор, отвечает заведомо нестационарному состоянию.

Рассмотрение эволюции квазичастицы требует введения именно неустойчивой волновой функции. Уравнения (24. 3), (24. 4), выведенные в предположении о том, что функция $\Psi_{v_n}(-\infty)$ отвечает наличию одной частицы на фоне основного состояния системы, описывают поведение этой частицы при включении корреляционного взаимодействия. Возникающий при этом включении объект и является квазичастицей. Совершенно аналогичным образом при выключении корреляционного взаимодействия квазичастица должна переходить в обычную частицу. Поэтому принятое предположение о виде функции $\Psi_{v_n}(-\infty)$ обязательно. Если же рассматривать истинное стационарное состояние системы, то при выключении корреляционного взаимодействия мы придем к состоянию, содержащему, помимо частицы, еще некоторое число пар. Это состояние, конечно, содержит более одной квазичастицы*. Из вида волновой функции, определяемой соотношением (24. 4), непосредственно следует, что величина E_p^{\rightarrow} , очевидно, совпадает с энергией квазичастицы. Видно, что уравнение (24. 3) в точности отвечает полюсу функции Грина. При отыскании корней этого уравнения необходимо только следить, чтобы их мнимая часть — величина $-\Gamma_p^{\rightarrow}$ — была отрицательной, т. е. чтобы происходило именно затухание.

К этим же результатам приводят рассуждения, основанные на спектральной формуле для функции Грина. Как было выяснено в § 23, если аналитическое продолжение функции Грина

* В стационарном состоянии не имеет смысла говорить о точном числе квазичастиц, так как последнее не является интегралом движения.

в нижнюю полуплоскость имеет полюс в точке $E_p^* - i\Gamma_p^*$, то в возбужденном состоянии системы присутствует узкий пакет стационарных состояний шириной порядка Γ_p^* , причем эволюция системы происходит по закону (23. 4). Точнее говоря, если считать, что плотность уровней $A(\vec{p}, E)$ сводится к своему полюсному члену (23. 29), т. е. что возбужденное состояние отличается от основного только присутствием волнового пакета, то этот пакет (квази-частица) имеет энергию E_p и затухание Γ_p .

Таким образом, энергия (закон дисперсии) и затухание квази-частицы непосредственно связаны с одночастичной функцией Грина. В однородном случае обе эти величины определяются просто действительной и мнимой частью полюса аналитического продолжения фурье-образа функции Грина в нижнюю полуплоскость*. В общем случае для их нахождения нужно решить уравнение, получающееся из выражения (22. 16) подстановкой $\Phi \sim \exp(-iE_n t - \Gamma_n t)$, т. е.

$$(E_n - i\Gamma_n - T - W)\Phi_n(q_1) - \int dq_2 M(q_1, q_2, E_n - i\Gamma_n)\Phi_n(q_2), \quad (24. 5)$$

где $M(q_1, q_2, \varepsilon)$ — фурье-образ массового оператора.

Рассмотрим подробнее с этой точки зрения однородный случай. Имеем

$$E_p - i\Gamma_p - \varepsilon_p - M(\vec{p}, E_p - i\Gamma_p) = 0. \quad (24. 6)$$

Полагая $\Gamma_p \ll E_p$ и отделяя мнимую и действительную части приходим к системе уравнений, дающей следующие решения:

$$\left. \begin{aligned} E_p &= \varepsilon_p + \operatorname{Re} M(\vec{p}, E_p), \\ \Gamma_p &= \frac{\operatorname{Im} M(\vec{p}, E_p)}{1 - \frac{\partial \operatorname{Re} M(E_p)}{\partial E_p}}. \end{aligned} \right\} \quad (24. 7)$$

Мнимая часть функции Грина может быть выражена в виде

$$\operatorname{Im} G = -\frac{\operatorname{Im} M}{|M|^2}.$$

Таким образом, величина Γ и $\operatorname{Im} G$ обращаются в нуль одновременно. Как мы видели в § 23, величина $\operatorname{Im} G$ меняет знак в точке $\varepsilon = \mu$ и в предположении ее непрерывности обращается в этой точке в нуль. При этом знак Γ положителен при $\varepsilon > \mu$ и отрицателен при $\varepsilon < \mu$.

* Это относится к случаю $\varepsilon > \mu$. При $\varepsilon < \mu$ аналитическое продолжение $G(\vec{p}, \varepsilon)$ в верхнюю полуплоскость дает характеристики квазидырки, которая описывается величиной $\tilde{\Phi}_n(1)$, зависящей от времени по закону $\exp(iEt_1 - \Gamma t_1)$.

Рассмотрим функцию Грина в окрестности точки $\varepsilon = \mu$. Предположим для простоты, что в системе не могут образовываться коррелированные пары, приводящие к сверхпроводимости*. Тогда массовый оператор не имеет особенности вблизи точки $\varepsilon = \mu$. Это позволяет разложить выражение для G^{-1}

$$G^{-1}(\vec{p}, \varepsilon) = \varepsilon - \varepsilon_p - \operatorname{Re} M(\vec{p}, \varepsilon) - i \operatorname{Im} M(\vec{p}, \varepsilon)$$

в ряд около точки $\varepsilon = \mu$ и $p = p_0$ где p_0 — корень уравнения

$$\mu = \varepsilon_p \Big|_{p=p_0} + M(p_0, \mu) = E_p \Big|_{p_0}. \quad (24.8)$$

Используя выражение (24.7), находим

$$G^{-1}(\vec{p}, \varepsilon) = Z_p^{-1} \left[\varepsilon - \mu - v(p - p_0) - i Z_p \operatorname{Im} M \right], \quad (24.9)$$

где $Z_p^{-1} = 1 - \frac{\partial \operatorname{Re} M(\varepsilon, p_0)}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=\mu}$ — введенный выше фактор,

а $v = Z_p \frac{\partial E_p}{\partial p} \Big|_{p_0}$ — скорость квазичастицы на границе Ферми.

Величина $Z_p \operatorname{Im} M$ пропорциональна $(\varepsilon - \mu)^2 \operatorname{sign}(\varepsilon - \mu)$, т. е. вблизи границы Ферми это бесконечно малая величина высшего порядка [105]. Это обстоятельство позволяет заключить, что в окрестности границы Ферми представление о квазичастицах может считаться оправданным. Именно по этой причине понятием квазичастиц можно пользоваться лишь для слабозбужденных состояний системы.

24.4. Сопоставляя выражение (24.1) с выражением для свободной функции Грина, мы видим, что в окрестности точки $\varepsilon = \mu$ точная функция Грина вполне подобна свободной функции Грина. Исходя из смысла величины ε_f в соотношении (10.7), определяющей границу заполнения частиц, видно, что химический потенциал μ играет роль энергии, определяющей границу заполнения квазичастиц. Таким образом, можно сказать, что характер заполнения уровней квазичастиц системы в основном состоянии такой же, как в идеальном газе. Если ввести числа заполнения квазичастиц n , то

$$n = \theta(\mu - E_p). \quad (24.10)$$

Это соотношение справедливо только при условии малости Γ_p , т. е. при небольших значениях $E_p - \mu$.

* Сверхпроводящей ситуации отвечает полюс функции M вблизи границы Ферми [105]. В отсутствие сверхпроводимости разложение массового оператора имеет вид:

$$M(\vec{p}, \varepsilon) = M_0(\vec{p}, \varepsilon) + i\alpha(\varepsilon - \mu)^2 \operatorname{sign}(\varepsilon - \mu) + \beta(\varepsilon - \mu)^3 \ln\left(\frac{|\varepsilon - \mu|}{\mu}\right) + \dots$$

где M_0 — регулярная в точке μ функция.

Величину p_0 , являющуюся корнем уравнения (24. 8), естественно считать граничным импульсом квазичастиц. Она совпадает с величиной p_0 , введенной в разделе 24. 2. В условиях применимости теории возмущений (в частности, в отсутствии эффектов сверхпроводимости) величина p_0 та же, что и для идеального газа, т. е.

$$p_0 = \left(\frac{6\pi^2 \varrho}{g} \right)^{1/3}, \quad (24. 11)$$

где ϱ — плотность числа частиц системы [7, 106]. Точнее можно сказать [107], что если уравнение $E_{p_0} = \mu$ имеет вещественный корень (а в случае сверхпроводящей ситуации это не так [108]), то он совпадает с выражением (24. 11).

Таким образом, распределение квазичастиц по импульсам представляет собой ступенчатую функцию и может быть записано в виде

$$\varrho(\vec{p}) = \theta(p_0^2 - p^2). \quad (24. 12)$$

Интересно отметить, что и в распределении по импульсам истинных частиц, которое совпадает с выражением (24. 12) лишь при отсутствии корреляционного взаимодействия, также сохраняется, хотя и частично, ступенчатый характер [109]. Для доказательства рассмотрим общее выражение для $\varrho(\vec{p})$

$$\varrho(\vec{p}) = i \int_C \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\vec{p}, \varepsilon).$$

Подставляя сюда выражение для функции Грина (24. 1) и учитывая, что затухание $\Gamma_{\vec{p}}$ меняет знак при переходе точки $\varepsilon = \mu$ или, что то же, $p = p_0$, заключаем, что при $p < p_0$ полюс функции Грина лежит внутри контура C , а при $p > p_0$ выходит из него. Учитывая, что вычет в этом полюсе равен Z_{p_0} , находим

$$\varrho(p_0 - 0) - \varrho(p_0 + 0) = Z_{p_0}. \quad (24. 13)$$

Так как величина $\varrho(p)$ заключена между нулем и единицей, приходим к неравенству

$$|Z_{\vec{p}}| \leq 1,$$

т. е. скачок в распределении меньше, чем в случае идеального газа. Примерный качественный ход $\varrho(p)$ изображен на рис. 50.

Отметим полезное соотношение, связывающее граничную энергию квазичастиц μ со средней энергией E/N , приходящейся на одну частицу в основном состоянии,

$$E/N = \mu. \quad (24. 14)$$

Это соотношение, введенное Гугенгольцем и Ван-Ховом [106], справедливо в применении к самосжатым однородным системам, которые находятся в равновесии, если нет внешнего давления

(ядерная материя)*. Для доказательства можно воспользоваться соотношениями $E = Nf(\rho)$, $\partial E/\partial N = \mu$, $(\partial E/\partial \Omega)_N = -\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \times (E/N) = -P$, где P — внешнее давление. Это дает

$$\mu = E/N + P/\rho,$$

откуда при $P = 0$ и следует соотношение (24. 14), удобное для проверки согласованности результатов вычисления одночастичной энергии $E_{\rightarrow p}$ и полной энергии системы [106].

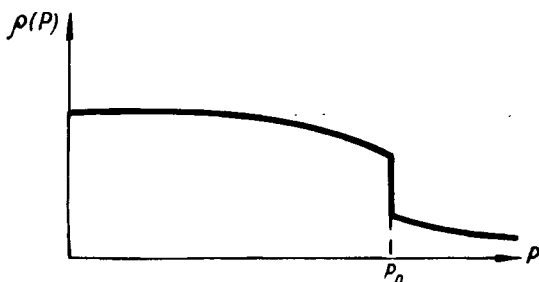


Рис. 50

24. 5. Укажем физический смысл величины $Z_{\rightarrow p}$. Выражению (24. 1) для функции Грина отвечает следующий выбор весовых функций A и B соотношениях (23. 11) и (23. 13):

$$A(\vec{p}, E) = Z_{\rightarrow p} \delta(E + \mu - E_{\rightarrow p}) + \dots,$$

$$B(\vec{p}, E) = Z_{\rightarrow p} \delta(E - \mu + E_{\rightarrow p}) + \dots,$$

причем $E_{\rightarrow p}$ считается близким к μ , что необходимо с точки зрения малости $\Gamma_{\rightarrow p}$. В приведенных выражениях опущены слагаемые, имеющие регулярное поведение и ответственные за неполюсной член в выражении (24. 1).

Функции A и B имеют положительный знак, значит $Z_{\rightarrow p} > 0$ и окончательное неравенство для $Z_{\rightarrow p}$ имеет вид

$$0 \leq Z_{\rightarrow p} \leq 1. \quad (24. 15)$$

Таким образом, скачок функции $\rho(p)$ в точке $p = p_0$ происходит в сторону уменьшения ρ при увеличении p (см. рис. 50).

* Это означает, что энергия имеет минимум при данном значении ρ ($\partial E/\partial \rho = 0$).

Далее, переписывая выражение (23. 6') в виде

$$A(\vec{p}, E) = |a_{n\vec{p}}|^2 \delta(E + \mu - E_{\vec{p}}),$$

получим $Z_{\vec{p}} = |a_{n\vec{p}}|^2$. Но величину $a_{n\vec{p}}$ можно записать в виде

$$a_{n\vec{p}} = \langle \Psi | a_{\vec{p}} | \Psi_n \rangle,$$

где $a_{\vec{p}}$ — оператор уничтожения частицы в состоянии с импульсом \vec{p} . Значит, $a_{n\vec{p}}$ представляет собой амплитуду вероятности; а $Z_{\vec{p}}$ — просто вероятность обнаружить одну квазичастицу в состоянии $a_{\vec{p}}^+ \Psi$, где имеется одна обычная частица сверх основного состояния. Напомним, что состояние Ψ_n содержит квазичастицу на фоне основного состояния. Аналогичные рассуждения можно провести с функцией $B(\vec{p}, E)$; при этом выяснится, что $Z_{\vec{p}}$ одновременно является вероятностью обнаружить квазидырку в состоянии с одной дыркой.

Величина, аналогичная $Z_{\vec{p}}$, в релятивистской теории поля называется константой перенормировки. Процедура перенормировки физических величин — характеристик частиц (массы) и их взаимодействия (константы связи), хотя и ассоциируется обычно с расходимостями теории поля, не имеет по существу к ним прямого отношения. Цель перенормировки состоит в том, чтобы привести в правильное соответствие величины, фигурирующие в теории, с наблюдаемыми на опыте величинами. В частности, масса свободной частицы в релятивистской теории поля является ненаблюдаемой величиной, поскольку не существует условий, при которых частица была бы изолирована от своего собственного поля. Поэтому с наблюдаемой массой, которая должна фигурировать в выкладках, следует отождествить не массу свободной частицы, а величину, полученную с учетом всех эффектов взаимодействия частицы с ее собственным полем. В этом и состоит процедура перенормировки, которая в некоторых частных моделях приводит одновременно к устранению расходимостей.

В свободной от расходимостей нерелятивистской проблеме многих частиц нет никакой необходимости проводить перенормировку*. В данном случае массы и заряды свободных (изолированных от системы) частиц являются непосредственно наблюдаемыми величинами. Более того, задача микроскопической тео-

* Сказанное не относится к тем частицам, которые своим существованием обязаны взаимодействию между частицами системы — фононам, экситонам и т. п. Для таких частиц перенормировка при определенной постановке задачи может стать обязательной [110—112].

рии в том и состоит, чтобы выразить интересующие нас характеристики системы именно через характеристики свободных частиц.

Следует, конечно, иметь в виду, что при учете взаимодействия между частицами их характеристики меняются. Меняется закон дисперсии частиц, в частности, их масса. Меняется также и закон взаимодействия между частицами (см. § 26, 27). Может оказаться удобным все рассуждения вести на языке этих измененных характеристик частиц, что в известном смысле эквивалентно проведению перенормировки. Однако в микроскопической теории в конце концов понадобится выразить эти измененные характеристики через характеристики изолированных частиц. Что же касается феноменологической теории, то там перенормировочный подход необходим.

24. 6. Рассмотрим энергию основного состояния системы на языке квазичастиц. Подставляя в формулу (19. 20) спектральное соотношение (23. 11) и применяя теорему о вычетах, получим

$$E = \frac{1}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3p \int_0^{\infty} dEB(\vec{p}, E) \left(\mu - E + \frac{p^2}{2M} \right). \quad (24. 16)$$

Величина $\int_0^{\infty} dEB(\vec{p}, E)$ определяет распределение по импульсам в основном состоянии системы (см. § 23), а сама функция $B(\vec{p}, E)$ дает плотность уровней возбужденных состояний системы $N - 1$ частиц вблизи точки $E = \Delta E_n + \mu$. Функцию $B(\vec{p}, E)$ можно представить в виде $\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\vec{p}, \mu - E)$. Поэтому

$$E = \int d^3p \int_{-\infty}^{\mu} \frac{dx}{2\pi} \text{Im} G(\vec{p}, x) \left(x + \frac{p^2}{2M} \right).$$

Продолжая $\text{Im} G$ (или просто G) в верхнюю полуплоскость, приходим к особенности, находящейся в точке $E_{\vec{p}} + i\Gamma_{\vec{p}}$ *,

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{Z_{\vec{p}}}{\varepsilon - E_{\vec{p}} - i\Gamma_{\vec{p}}}.$$

Подставляя это выражение в предыдущую формулу и выполняя несложное интегрирование, получим при малых Γ

$$E = \frac{1}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3p \theta(\mu - E_{\vec{p}}) Z_{\vec{p}} (E_{\vec{p}} + p^2/2M). \quad (24. 17)$$

* Величины $Z_{\vec{p}}$, $E_{\vec{p}}$ и $\Gamma_{\vec{p}}$ отличаются от введенных выше, поскольку аналитическое продолжение делается в другой области и в другую полуплоскость. Однако вблизи границы Ферми, где $\Gamma_{\vec{p}}$ мало, этой разницей можно пренебречь. Это связано с симметрией между частицами и дырками, имеющей место вблизи границы Ферми.

Это соотношение становится ясным, если обратиться к результатам § 4. В приближении Хартри — Фока энергия однородной системы может быть записана в виде

$$E_0 = \frac{1}{2} \text{Sp}_{\sigma\tau} \int d^3\rho\theta(\epsilon_F - \epsilon_{\rho}) (\epsilon_{\rho} + p^2/2M).$$

Она представляет собой сумму энергий частиц ϵ_{ρ} минус половина энергии взаимодействия между ними.

Вклад квазичастиц в точное выражение для энергии получается заменой ϵ_{ρ} на E_{ρ} и введением вероятности обнаружения квазичастицы Z_{ρ} . Таким образом, и с энергетической точки зрения возможно одночастичное описание системы. Однако при этом нужно включить в рассмотрение самосогласованное взаимодействие между квазичастицами.

§ 25. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА

25. 1. Перейдем к решению задачи о вычислении одночастичной и парной функции Грина по заданному потенциалу взаимодействия между частицами.

Эта задача, хотя и более простая, чем задача точного решения уравнения Шредингера*, остается чрезвычайно сложной. Понять, в чем состоит эта сложность, можно с помощью следующих рассуждений.

Согласно результатам § 20, парная и одночастичная функции Грина полностью определяются, если известна вершинная часть Δ . Поэтому рассматриваемая задача целиком сводится к определению величины Δ .

Даже самый поверхностный анализ диаграмм теории возмущений, вносящих вклад в Δ , показывает, что при увеличении n — порядка теории возмущений — очень резко возрастает сложность топологической структуры этих диаграмм. Это важное обстоятельство немедленно отражается на математической структуре теории. Уравнения, определяющие функции Грина (или вершинную часть), не могут быть записаны в виде конечной системы интегральных уравнений. Приходится иметь дело либо с бесконечной совокупностью зацепляющихся интегральных уравнений, каждое из которых связывает функции Грина соседнего порядка (см. § 20), либо с конечной системой уравнений в функциональных производных [6, 11]. Последние уравнения, имеющие внешне весьма компактный вид, в математическом отношении представляют собой объект, несравненно более сложный, чем интегральные

* Решение уравнения Шредингера дает информацию, содержащуюся во всех функциях Грина; имеются в виду, в частности, трехчастичные характеристики системы, которые не могут быть описаны с помощью одночастичной и парной функций Грина.

уравнения. Изложение функциональных методов теории поля выходит за рамки этой книги.

Мы выберем в дальнейшем более простой путь прямого анализа диаграмм вершинной части. Этот путь оказывается возможным благодаря тому, что мы сознательно ограничиваемся рассмотрением узкого класса задач: теориями разреженных и сжатых систем. Такие системы характеризуются тем, что из всего множества диаграмм вершинной части можно отобрать сравнительно простую их подсовкупность.

25. 2. Итак, обратимся к исследованию диаграмм, входящих в величину Δ . Эта величина объединяет все диаграммы вершинной части, в которых выходные точки соединены друг с другом. Топологическая структура таких диаграмм весьма сложна.

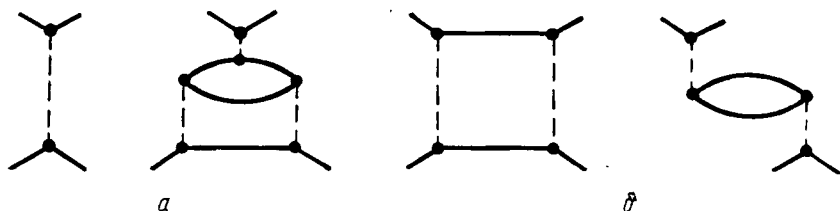


Рис. 51

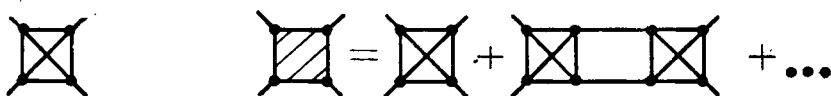
Введем понятие о компактных диаграммах Δ_k , входящих в Δ . Эти диаграммы нельзя рассечь линией, пересекающей только две сплошные линии графика. Примеры компактных диаграмм приведены на рис. 51, а, некомпактных — на рис. 51, б.

Комбинируя друг с другом компактные диаграммы, можно получить все диаграммы, входящие в Δ . В принципе можно было бы ожидать, что топологическая сложность диаграмм Δ объясняется сложностью диаграмм, входящих в компактную часть Δ_k . В то же время связь между Δ и Δ_k могла бы оказаться сравнительно простой. Именно так обстоит дело с собственно энергетической частью S -матрицы, где имеется простое соотношение между функциями Σ и M , и все качественное многообразие диаграмм Σ вызывается компактной частью M . Если бы аналогичная ситуация наблюдалась в отношении вершинной части, то с самого начала имело бы смысл исключить из рассмотрения некомпактную вершинную часть Δ , заменив ее более простой компактной частью Δ_k .

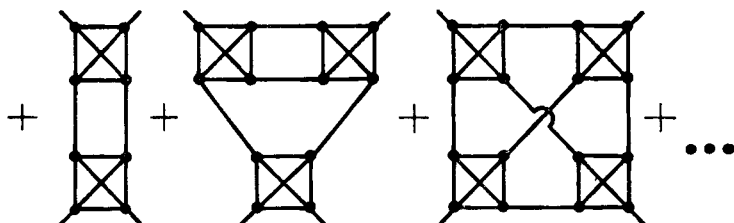
Однако дело обстоит иначе. Оказывается, связь между функциями Δ и Δ_k сама по себе чрезвычайно сложная, и сложность топологической структуры диаграмм Δ в значительной мере обусловлена характером этой связи. При этом нельзя забывать и то, что сами диаграммы Δ_k также имеют весьма сложную структуру.

Для иллюстрации рассмотрим несколько простейших комбинаций компактных частей Δ_k (рис. 52, а). Многообразие полу-

чающихся при этом геометрических структур (см. рис. 52, б) связано с наличием у диаграмм Δ_k четырех свободных концов, которые могут «зацепляться» со свободными концами других диаграмм Δ_k большим числом способов. Для диаграмм собственно энергетической части, имеющих лишь два свободных конца, существует только один способ зацепления. В этом и состоит существенное отличие диаграмм вершинной и собственно энергетической частей.



a



b

Рис. 52

Таким образом, переход к компактной вершинной части в общем случае едва ли может считаться возможным. В тех случаях, когда из совокупности диаграмм рис. 52 можно выбрать некоторую простую подсовокупность, наиболее целесообразно составлять приближенные уравнения для некомпактной вершинной части Δ .

25. 3. Рассмотрим с этой точки зрения разреженные (нерезонансные) системы многих частиц. Главными для таких систем являются диаграммы, содержащие минимальное число линий дырок. Проведенный в § 16 анализ относился непосредственно лишь к собственно энергетической части, однако полученные там результаты относятся и к вершинной части. Подлежащие учету диаграммы Δ изображены на рис. 53. В линии частиц, входящие в эти диаграммы, можно не включать собственно энергетических вставок, поскольку они обязательно содержат дырочные линии.

При сравнении рис. 53 и рис. 52 видно, что из всех диаграмм рис. 52 достаточно оставить диаграммы с «горизонтальным» зацеплением Δ_k (рис. 54, a). При этом обменные диаграммы получатся, если вместо простого произведения функций Грина $G_0(1, 3)$, $G_0(2, 4)$ ввести парную функцию Грина $G_0(1, 2, 3, 4)$. Совокупность диаграмм рис. 54, a можно заменить диаграммой рис. 54, б.

Последней диаграмме можно с помощью правил Фейнмана поставить в соответствие следующее интегральное уравнение:

$$\Delta(1, 2, 3, 4) = \Delta_k(1, 2, 3, 4) + \int d5 d6 d7 d8 \Delta_k(1, 2, 5, 6) G_0(5, 6, 7, 8) \Delta(7, 8, 3, 4).$$

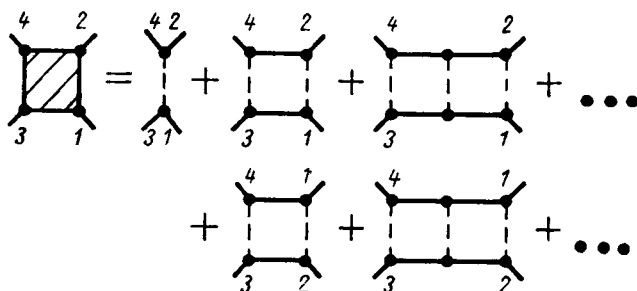


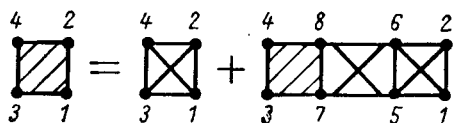
Рис. 53

Компактную вершинную часть в рассматриваемом случае можно заменить ее выражением в низшем порядке теории возмущений

$$\Delta_k(1, 2, 3, 4) = -\frac{i}{4} V(1, 2) [\delta(1-3) \delta(2-4) - \delta(1-4) \delta(2-3)].$$



a



b

Рис. 54

Тогда получим следующее уравнение:

$$\Delta(1, 2, 3, 4) = -\frac{i}{2} V(1, 2) \left\{ \frac{1}{2} [\delta(1-3) \delta(2-4) - \delta(1-4) \delta(2-3)] + \int d7 d8 G_0(1, 2, 7, 8) \Delta(7, 8, 3, 4) \right\}. \quad (25.1)$$

В данном случае можно без труда написать для парной функции Грина интегральное уравнение, являющееся аналогом уравнения Дайсона для одночастичной функции Грина. Рассмотрим с этой целью комбинацию

$$\begin{aligned} & \int d3 d4 \Delta(1, 2, 3, 4) G_0(3, 4, 1', 2') = \\ & = \int d3 d4 \Delta_k(1, 2, 3, 4) [G_0(3, 4, 1', 2') + \\ & + \int d5 d6 d7 d8 G_0(3, 4, 7, 8) \Delta(7, 8, 5, 6) G_0(5, 6, 1', 2')]. \end{aligned}$$

Величина в квадратных скобках совпадает с парной функцией Грина $G(3, 4, 1', 2')$, поскольку разницей между функциями $\tilde{G}(1, 2, 3, 4)$ и $G_0(1, 2, 3, 4)$ в случае разреженной системы можно пренебречь. Таким образом,

$$\begin{aligned} \int \Delta(1, 2, 3, 4) G_0(3, 4, 1', 2') d3 d4 &= \\ = \int d3 d4 \Delta_k(1, 2, 3, 4) G(3, 4, 1', 2'). \end{aligned} \quad (25. 2)$$

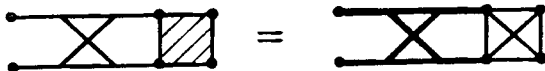


Рис. 55

Подставляя полученное соотношение (рис. 55) в уравнение (20. 11), приходим к искомому интегральному уравнению для парной функции Грина

$$\begin{aligned} G(1, 2, 1', 2') &= G_0(1, 2, 1', 2') + \\ + 2 \int d3 d4 d5 d6 G_0(1, 3) G_0(2, 4) \Delta_k(3, 4, 5, 6) G(5, 6, 1', 2'); \end{aligned}$$

подставляя для Δ_k его выражение, получим

$$\begin{aligned} G(1, 2, 1', 2') &= G_0(1, 2, 1', 2') - \\ - i \int d3 d4 G_0(1, 3) G_0(2, 4) V(3, 4) G(3, 4, 1', 2'). \end{aligned} \quad (25. 3)$$

Графически это уравнение изображено на рис. 56.

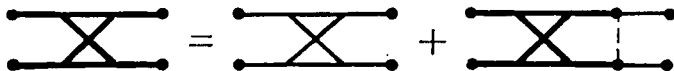


Рис. 56

25. 4. Исходя из уравнения (25. 1), нетрудно найти выражение для одночастичной функции Грина. Достаточно ограничиться определением массового оператора. Обращаясь к соотношению (20. 18), учитывая, что диаграммы, отвечающие M_1 и M_2 , дают пренебрежимый вклад (включая дополнительное число дырок), и заменяя функции G на G_0 , получим

$$\begin{aligned} M(1, 2) &= -4i \int d3 d4 d5 d6 \lim_{\substack{7 \rightarrow 3 \\ t_1 > t_2 > t_1}} V(1, 3) \times \\ &\times G_0(3, 4) G_0(1, 5) \Delta(4, 5, 6, 2) G_0(6, 7). \end{aligned} \quad (25. 4)$$

С учетом уравнения (25. 1) величина

$$-iV(1, 3) \int d4 d5 G_0(3, 4) G_0(1, 5) \Delta(4, 5, 6, 2)$$

может быть представлена в виде

$$\Delta(3, 1, 6, 2) \div \frac{i}{4} V(1, 3) [\delta(3-6) \delta(1-2) - \delta(3-2) \delta(1-6)].$$

Таким образом,

$$M(1, 2) = 4 \int d^3 d^4 \lim_{\substack{5 \rightarrow 3 \\ t_5 > t_3 > t_1}} \{ \Delta(3, 1, 4, 2) + \\ + \frac{i}{4} V(1, 3) [\delta(3-4) \delta(1-2) - \delta(3-2) \delta(1-4)] \} G_0(4, 5). \quad (25.5)$$

Это выражение соответствует замыканию двух «хвостов» вершинной части. Второй член в фигурной скобке (25.5) компенсирует низший член разложения Δ в ряд теории возмущений.

Перейдем к вычислению энергии разреженной системы. Для этой цели удобнее всего воспользоваться общим уравнением (19.19), в которое следует подставить уравнение Дайсона. Это даст

$$E - E_0 = -\frac{i}{2} \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 > t_1}} \int d^3 M(1, 3) G_0(3, 2).$$

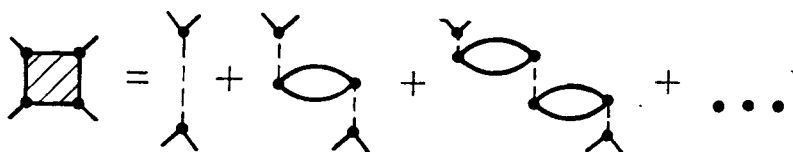


Рис. 57

В последнем множителе мы пренебрегли разностью между G и G_0 и заменили $i \frac{\partial}{\partial t} + T$ на $i \frac{\partial}{\partial t} + T + W$ (разница между этими выражениями мала). Подставляя выражение (25.5), получим

$$E - E_0 = -2i \int dq_1 \lim_{\substack{2 \rightarrow 1 \\ t_2 > t_1}} \int d^3 d^4 d^5 \times \\ \times \left\{ \Delta(4, 1, 5, 3) + \frac{i}{4} V(1, 4) [\delta(4-5) \delta(1-3) - \delta(4-3) \delta(1-5)] \right\} \times \\ \times G_0(5, 6) G_0(3, 2). \quad (25.6)$$

Исследование полученных соотношений будет проведено в следующем параграфе.

25.5. В сжатых системах многих частиц наиболее существенную роль играют диаграммы, содержащие максимально возможное число замкнутых петель. Соответствующие диаграммы вершинной части Δ изображены на рис. 57. Собственно энергетические вставки в сплошные линии диаграмм можно не учитывать. Кроме того, можно отбросить обменные диаграммы.

При сопоставлении рис. 52 и 57 видно, что в этом случае существенны диаграммы с вертикальным зацеплением (рис. 58), причем в качестве компактной части Δ_k можно также выбрать его выражение в низшем порядке теории возмущений, т. е.

$$\Delta_k(1, 2, 3, 4) = -\frac{i}{4} V(1, 2) [\delta(1-3) \delta(2-4) - \delta(1-4) \delta(2-3)].$$

Оказывается, что в сжатых системах величину Δ можно искать в таком же виде

$$\Delta(1, 2, 3, 4) = -\frac{i}{4} \gamma(1, 2) [\delta(1-3)\delta(2-4) - \delta(1-4)\delta(2-3)]. \quad (25. 7)$$

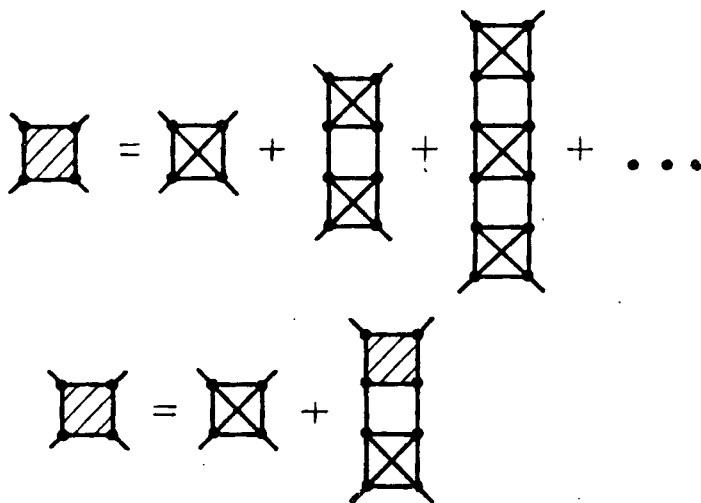


Рис. 58

Справедливо следующее интегральное уравнение для γ [78]:

$$\gamma(1, 2) = V(1, 2) - i \int d3 d4 V(1, 3) G_0(3, 4) G_0(4, 3) \gamma(4, 2). \quad (25. 8)$$

Вводя графический образ эффективного потенциала γ (рис. 59, а), это уравнение можно наглядно интерпретировать (см. рис. 59, б):

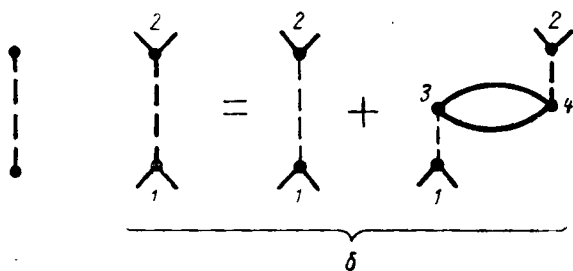


Рис. 59

Не составляет труда выразить через γ парную функцию Грина. Подстановка выражения (25. 7) в (20. 11) дает

$$G(1, 2, 1', 2') - \tilde{G}(1, 2, 1', 2') = -i \int d3 d4 G_0(1, 3) G_0(2, 4) \gamma(3, 4) G_0(3, 4, 1', 2'). \quad (25. 9)$$

Здесь мы оставляем в левой части величину \tilde{G} , в которой учтена корреляция частиц с системой. Рис. 60 иллюстрирует разницу между разреженной (а) и сжатой (б) системами. Видно, что в сжатой системе включение собственно энергетической вставки в свободный член уравнения (25. 9) дает диаграммы того же характера, что и учет корреляции между обеими рассматриваемыми частицами.

Уравнение (25. 9) также можно свести к интегральному [113]. Оно принимает довольно громоздкий вид

$$G(1, 2, 1', 2') - \tilde{G}(1, 2, 1', 2') = \\ = \frac{i}{2} \int d3 d4 V(3, 4) [A(11'22'34) + \\ + A(22'11'34) - A(12'21'34) - A(21'12'34)], \quad (25. 10)$$

где $A(11' 22' 34) = [G(1, 3, 1', 3) - G_0(1, 1') G_0(3, 3)] G_0(2, 4) G_0(4, 2')$.

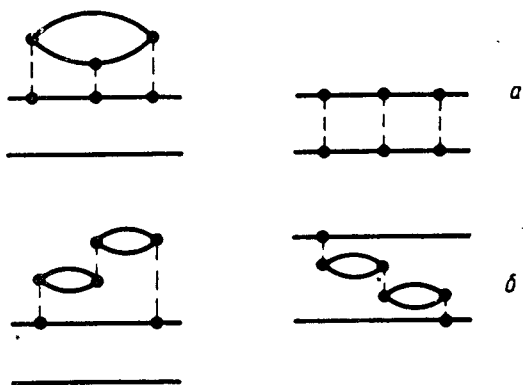


Рис. 60

Полученное уравнение, как и уравнение (25. 3) для разреженной системы, относится к общему типу, о котором говорилось в разделе 20. 3. Однако пользоваться этими уравнениями неудобно; гораздо целесообразнее решить уравнения для вершинной части (25. 1) или (25. 8), а затем использовать соотношения между парной функцией Грина и вершинной частью (20. 9) — (20. 12).

25. 6. Определим одночастичную функцию Грина сжатой системы. Общее выражение (20. 18) для массового оператора, в котором можно пренебречь членами M_1 и M_2 , после подстановки выражения (25. 7) в (25. 4) приобретает следующий вид:

$$M(1, 2) = - \int d3 d4 \lim_{5 \rightarrow 4} V(1, 3) \times \\ \times G_0(3, 4) G_0(1, 2) \gamma(4, 2) G_0(4, 5).$$

С учетом уравнения (25. 8) выражение для M значительно упрощается

$$M(1, 2) = -i [\gamma(1, 2) - V(1, 2)] G_0(1, 2). \quad (25. 11)$$

И здесь низший член разложения γ в ряд теории возмущений автоматически выпадает. Выражение (25. 11) легко интерпретировать, как результат замыкания двух свободных концов вершинной части.

Для вычисления энергии сжатой системы удобнее всего использовать выражение (19. 21). Необходимо только заменить $V(1, 2)$

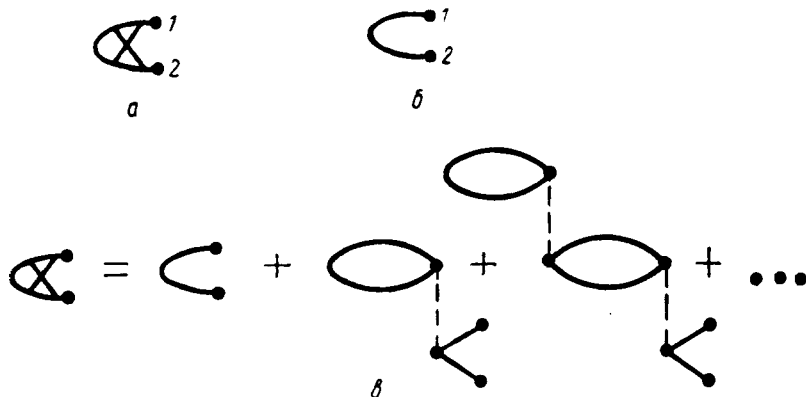


Рис. 61

в соотношениях (25. 8) и (25. 11) на $\lambda V(1, 2)$. В выражении (19. 21) можно пренебречь последним членом, содержащим оператор W . Заменяя функцию G на G_0 , получаем

$$E - E_0 = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int dq_1 \int d^3 [\gamma(1, 3) - \lambda V(1, 3)] \times \\ \times G_0(1, 3) G_0(3, 1). \quad (25. 12)$$

Существенный интерес представляет получение интегрального уравнения для матричного элемента $\Phi_n(1, 2)$ в сжатой системе. В разделе 22. 5 мы пришли к уравнению ($G \approx G_0$)

$$\Phi_n(1, 2) = \bar{\Phi}_n(1, 2) + 4 \int d^3 d^4 d^5 d^6 G_0(1, 3) G_0(5, 2) \times \\ \times \Delta(3, 4, 5, 6) \bar{\Phi}_n(6, 4). \quad (25. 13)$$

После подстановки в это уравнение выражения для Δ из соотношения (25. 7) интеграл в правой части примет вид

$$-i \int d^3 d^4 G_0(1, 3) G_0(3, 2) \gamma(3, 4) \bar{\Phi}_n(4, 4).$$

Соотношение

$$\int d^4 \gamma(3, 4) \bar{\Phi}_n(4, 4) = \int d^4 V(3, 4) \Phi_n(4, 4) \quad (25. 14)$$

аналогично по смыслу соотношению (25. 2) и может быть доказано графически. Вводя графические образы функций Φ (рис. 61, а) и $\bar{\Phi}$ (см. рис. 61, б), можно видеть, что в сжатой системе определяющими являются диаграммы Φ_n (см. рис. 61, в), которые соответствуют максимально возможному числу замкнутых петель. Изображенное на рис. 62 соотношение (25. 14) проверяется тогда непосредственно. Используя это соотношение, можно переписать выражение (25. 13) в виде следующего интегрального уравнения:

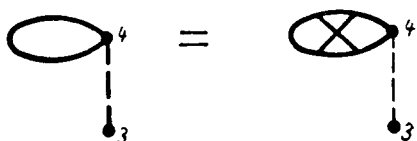


Рис. 62

$$\Phi_n(1,2) = \bar{\Phi}_n(1,2) + i \int d3d4 G_0(1,3) G_0(3,2) V(3,4) \Phi_n(4,4). \quad (25. 15)$$

Это уравнение играет важную роль при определении коллективных возбужденных состояний системы.

§ 26. ТЕОРИЯ РАЗРЕЖЕННЫХ СИСТЕМ МНОГИХ ЧАСТИЦ

26. 1. Используем развитые выше методы для того, чтобы дать количественное описание разреженных систем многих частиц, для которых радиус действия сил R мал по сравнению со средним расстоянием между частицами d ,

$$\eta = R/d \ll 1. \quad (26. 1)$$

При выполнении условия (26. 1) истинный потенциал взаимодействия между частицами можно заменить псевдопотенциалом (см. § 1), что позволяет описывать взаимодействие между частицами системы в терминах амплитуды расстояния частиц друг на друга. Это обстоятельство не может вызывать удивления, так как в разреженных системах процесс взаимодействия между частицами можно трактовать как последовательность актов рассеяния частиц друг на друга.

В этом параграфе будет дан вывод псевдопотенциала в рамках общей полевой схемы и будут подтверждены результаты, полученные в § 1, 7, 18; методом функций Грина будут найдены различные характеристики разреженной системы частиц [77]. Эти результаты представляют собой разложения физических величин в ряд по амплитуде рассеяния a , которая, как и радиус действия сил R , считается малой по сравнению со средним расстоянием между частицами *,

$$a/d \ll 1. \quad (26. 2)$$

*. Случай, когда это отношение не мало (резонансный случай), частично освещался в § 1 и 16.

Разложение по этому параметру (ему отвечает так называемое газовое приближение) в первых двух порядках описывает только парные корреляции между частицами. Начиная с членов порядка $(a/d)^3$, необходимо учитывать также вклад трехчастичных и более сложных корреляций. Оценки показывают [31], что вклад трехчастичных корреляций в энергию основного состояния разреженной системы определяется соотношением

$$E \approx 0,1 (ap_0)^3 \frac{p_0^2}{M} N. \quad (26. 3)$$

В теории ядерного вещества в последние годы получил широкое распространение так называемый метод Бракнера [2]. В своей основе этот метод состоит в точном учете парных корреляций между частицами при полном пренебрежении трехчастичными и более сложными корреляциями. В то время как в приближении Хартри — Фока описывается движение отдельной частицы в самосогласованном поле остальных частиц, в методе Бракнера дается точное описание взаимодействия каждой пары частиц, движущихся в самосогласованном поле остальных частиц.

Метод Бракнера вряд ли может считаться удовлетворительным. В самом деле, если параметр a/d не мал по сравнению с единицей, то метод Бракнера не учитывает сложных корреляций, начиная с трехчастичных, которые вносят существенный вклад. Если же указанный параметр мал, то в рамках этого метода излишне учитываются все степени параметра a/d . Можно сказать, что в области своей применимости, когда можно пренебречь трехчастичными корреляциями, метод Бракнера по существу совпадает с газовым приближением.

Полученное Бракнером хорошее согласие с опытом в отношении целого ряда характеристик ядерного вещества следует отнести за счет фактической малости параметра a/d . Благодаря этому можно избежать той громоздкости аппарата, которая присуща методу Бракнера *, что подтверждается результатами § 7, 18, полученными в рамках газового приближения с учетом первых членов разложения по параметру a/d . Метод Бракнера может оказаться оправданным лишь в тех случаях, когда по каким-либо причинам парные корреляции между частицами являются выделенными, например при описании сверхтекучести ядерного вещества.

26. 2. Переходим к решению уравнений для функций Грина разреженной системы многих частиц. Поскольку мы требуем лишь выполнения условия (26. 2), параметр борновского приближения $\alpha' \sim MV_0 R^2$ может быть и не мал по сравнению с единицей.

* Бракнер и Гаммел [2] указывают, что им пришлось провести численное интегрирование нескольких сот тысяч функций Грина соответствующего уравнения.

Будем исходить из основного для рассматриваемой задачи уравнения

$$\Delta(1, 2, 3, 4) = -\frac{i}{2} V(1, 2) \left\{ \frac{i}{2} [\delta(1-3) \delta(2-4) - \delta(1-4) \delta(2-3)] + 2 \int d5 d6 G_0(1, 5) G_0(2, 6) \Delta(5, 6, 3, 4) \right\}, \quad (26.4)$$

которое легко получить из уравнения (25.1).

Ограничиваясь рассмотрением пространственно-однородных систем, переведем уравнение (26.4) в импульсное пространство, полагая

$$\Delta(1, 2, 3, 4) = \int d^4 p_1 d^4 p_2 d^4 p_3 d^4 p_4 \Delta(p_1, q_1; p_2, q_2; p_3, q_3; p_4, q_4) \times \\ \times \delta(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) \exp [i(p_1 1) + i(p_2 2) - i(p_3 3) - i(p_4 4)].$$

После перехода к системе центра масс и введения суммарного импульса $P = p_1 + p_2 = p_3 + p_4$ и относительных импульсов $k = (p_1 - p_2)/2$, $k' = (p_3 - p_4)/2$ получим следующее уравнение*:

$$\Delta(P, k, k') = -\frac{i}{4} (2\pi)^4 \left[v(\vec{k} - \vec{k}') - v(\vec{k} + \vec{k}') \right] + \\ + i \int d^4 q v(\vec{k} - \vec{q}) G_0(P/2 + q) G_0(P/2 - q) \Delta(P, q, k'), \quad (26.5)$$

где

$$\Delta(P, k, k') \equiv \Delta(P/2 + k, P/2 - k, P/2 + k', P/2 - k').$$

Так как нет запаздывания, фурье-образ потенциала v зависит лишь от пространственных компонент вектора передаваемого импульса. Предположим, что таким же свойством обладает величина $\Delta(P, k, k')$, т. е. что наряду с P она зависит лишь от \vec{k} и \vec{k}' . Это предположение будет немедленно оправдано; оно позволяет провести в правой части уравнения (26.5) интегрирование по величине ζ — четвертой компоненте вектора q . Соответствующий интеграл

$$I = \int \frac{d\zeta}{2\pi} G_0(P/2 + q) G_0(P/2 - q)$$

легко вычислить по правилам, изложенным в приложении В,

$$I = -i \left[\frac{\left(\begin{matrix} 1-n \\ \vec{q} + \frac{\vec{P}}{2} \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} 1-n \\ \vec{q} - \frac{\vec{P}}{2} \end{matrix} \right)}{\varepsilon_{\vec{q} + \frac{\vec{P}}{2}} + \varepsilon_{\vec{q} - \frac{\vec{P}}{2}} - E + i\delta} - \frac{\varepsilon_{\vec{q} + \frac{\vec{P}}{2}} + \varepsilon_{\vec{q} - \frac{\vec{P}}{2}} - E - i\delta}{\varepsilon_{\vec{q} + \frac{\vec{P}}{2}} + \varepsilon_{\vec{q} - \frac{\vec{P}}{2}} - E + i\delta} \right],$$

* Это уравнение аналогично основному уравнению метода Бракнера.

где E — суммарная энергия частиц (четвертая компонента вектора P). Вводя величину

$$N(q) = 1 - n_{\vec{q} + \frac{\vec{P}}{2}} - n_{\vec{q} - \frac{\vec{P}}{2}},$$

можно написать

$$I = i \frac{N(q)}{\varepsilon_{\vec{q} + \frac{\vec{P}}{2}} + \varepsilon_{\vec{q} - \frac{\vec{P}}{2}} - i\delta N(q)}. \quad (26.6)$$

Таким образом, интегральное уравнение (26.5) принимает вид

$$\Delta(P, \vec{k}, \vec{k}') = -\frac{i}{4} (2\pi)^4 \left[v(\vec{k} - \vec{k}') - v(\vec{k} + \vec{k}') \right] - \int d^3q \frac{v(\vec{k} - \vec{q}) N(q)}{\varepsilon_{\vec{q} + \frac{\vec{P}}{2}} + \varepsilon_{\vec{q} - \frac{\vec{P}}{2}} - E - i\delta N(q)} \Delta(P, \vec{q}, \vec{k}'). \quad (26.7)$$

Из уравнения (26.7) видно, во-первых, что предположение о независимости Δ от четвертых компонент векторов k, k' не привело ни к каким противоречиям. Физически это означает, что учет корреляции между частицами разреженной системы не приводит к появлению запаздывания их эффективного взаимодействия. Во-вторых, отчетливо видна зависимость эффективного взаимодействия Δ от суммарного импульса пары. Это свидетельствует о нарушении в рассматриваемых условиях принципа относительности Галилея. Однако этот принцип и не должен соблюдаться, поскольку частицы взаимодействуют в среде и поскольку существует привилегированная система отсчета, в которой среда покоится как целое.

Заметим далее, что мы не выписывали явно дискретных индексов, полагая, что функция Грина G_0 и v пропорциональны δ_{q_1, q_2} .

Последнее замечание касается свойств симметрии $\Delta(P, \vec{k}, \vec{k}')$. Из условия антисимметрии $\Delta(p_1; p_2; p_3; p_4)$ относительно перестановки p_1, p_2 , а также p_3, p_4 следует антисимметрия $\Delta(P, \vec{k}, \vec{k}')$ относительно замены $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ и $\vec{k}' \rightarrow -\vec{k}'$. Будем искать решение уравнения (26.7) в виде

$$\Delta(P, \vec{k}, \vec{k}') = \frac{1}{2} \left[U(P, \vec{k}, \vec{k}') - U(P, \vec{k}, -\vec{k}') \right]. \quad (26.8)$$

Тогда для U получается уравнение

$$U(P, \vec{k}, \vec{k}') = -\frac{i}{2} (2\pi)^4 v(\vec{k} - \vec{k}') - \int d^3q \frac{v(\vec{k} - \vec{q}) N(q) U(P, \vec{q}, \vec{k}')}{\varepsilon_{\vec{q} + \frac{\vec{P}}{2}} + \varepsilon_{\vec{q} - \frac{\vec{P}}{2}} - E - i\delta N(q)}. \quad (26.9)$$

Как легко проверить итерациями, решение этого уравнения обладает свойством

$$U(P, -\vec{k}, \vec{k}') = U(P, \vec{k}, -\vec{k}').$$

Поэтому выражение (26. 8) дает величину, обладающую всеми требуемыми свойствами симметрии.

26. 3. Прямое решение уравнения (26. 9) представляет собой чрезвычайно сложную задачу. Это уравнение описывает рассеяние пары частиц друг на друге в среде, т. е. при учете принципа Паули. В случае разреженной системы эффекты среды играют сравнительно малую роль, поэтому представляется возможным выразить величину U (а вместе с ней и эффективный потенциал Δ) через характеристики рассеяния пары изолированных частиц. Во многих случаях именно эти характеристики (например, фазы рассеяния) непосредственно известны из эксперимента, а потенциал взаимодействия представляет собой производную величину; тогда рассматриваемый путь имеет непосредственную физическую ценность.

Для простоты ограничимся случаем квадратичного закона дисперсии частиц (общий случай удобнее рассматривать в рамках теории псевдопотенциала). Изменение закона дисперсии за счет самосогласованного короткодействующего взаимодействия незначительно при выполнении условия (26. 2). Поэтому, имея в виду проведение расчетов с точностью до $(a/R)^2$ включительно, мы можем считать закон дисперсии квадратичным (см. раздел 26. 5).

Рассмотрим уравнение Шредингера, описывающее рассеяние пары частиц в пустоте. Полученные результаты являются обобщением результатов § 1. Исходное уравнение имеет вид

$$(\Delta + k^2) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = MV(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

а в импульсном пространстве —

$$(p^2 - k^2) \psi_{\vec{k}}(\vec{p}) = -M \int d^3q v(\vec{p} - \vec{q}) \psi_{\vec{k}}(\vec{q}).$$

Его решение можно выразить в следующем виде (см. приложение В):

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{p}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{k}) - \frac{M}{p^2 - k^2 - i\delta} \int d^3q v(\vec{p} - \vec{q}) \psi_{\vec{k}}(\vec{q}),$$

где первый член описывает падающую волну, второй — расходящуюся.

Величина

$$a(\vec{p}, \vec{k}) = -\frac{M}{4\pi} \int d^3q v(\vec{p} - \vec{q}) \psi_{\vec{k}}(\vec{q}) \quad (26. 10)$$

может быть названа амплитудой рассеяния. Точнее говоря, она является обобщением обычного определения амплитуды рассеяния

на случай, когда нас интересует не только асимптотика волновой функции на больших расстояниях, но и вся функция $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Чтобы в этом убедиться, переведем уравнение

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{k}) + \frac{4\pi}{p^2 - k^2 - i\delta} a(\vec{p}, \vec{k}) \quad (26.11)$$

в координатное представление. При этом получается выражение

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r}) + a(-i\nabla, \vec{k}) \exp(ikr)/r.$$

Асимптотически при больших r можно заменить $-i\nabla$ на $k\vec{n}$ где \vec{n} — единичный вектор \vec{r} , и мы действительно вернемся к обычному определению амплитуды рассеяния.

Нашей последующей задачей будет полное исключение из полученных уравнений потенциала взаимодействия v , который может вообще не существовать («твердая сердцевина»), и замена его амплитудой рассеяния a .

Рассмотрим с этой целью равенство (26.10). Умножая его на $\psi_{\vec{k}}^*(\vec{p}')$, интегрируя по \vec{k} и учитывая условие полноты

$$\int d^3k \psi_{\vec{k}}^*(\vec{p}') \psi_{\vec{k}}(\vec{p}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}'),$$

найдем

$$v(\vec{p} - \vec{p}') = -\frac{4\pi}{M} \int d^3k a(\vec{p}, \vec{k}) \psi_{\vec{k}}^*(\vec{p}').$$

Подставляя сюда выражение (26.11), находим окончательное соотношение между амплитудой рассеяния и потенциалом

$$v(\vec{p} - \vec{p}') = -\frac{4\pi}{M} a(\vec{p}, \vec{p}') - \frac{(4\pi)^2}{M} \int \frac{d^3k a^*(\vec{p}', \vec{k}) a(\vec{p}, \vec{k})}{p'^2 - k^2 + i\delta}. \quad (26.12)$$

Удобно избавиться от входящих в правую часть этого уравнения мнимых величин. Для этого сделаем замену

$$a(\vec{p}, \vec{k}) = -\frac{l(\vec{p}, \vec{k})}{1 + ikl(\vec{k}, \vec{k})}. \quad (26.13)$$

Величина l является обобщением длины рассеяния (см. § 1 и 16) и представляет собой действительную функцию. Ограничимся наиболее важным случаем s -рассеяния, когда величина $l(\vec{p}, \vec{k})$ не зависит от углов.

Подстановка выражения (26. 13) в (26. 12) приводит к следующему уравнению:

$$v(\vec{p} - \vec{p}') = \frac{4\pi}{M} \cdot \frac{l(p, p')}{1 + p'^2 l^2(p', p')} - \\ - \frac{(4\pi)^2}{M} P \int d^3k \frac{l(p', k) l(p, k)}{(p'^2 - k^2) [1 + k^2 l^2(k, k)]}.$$

При выполнении условия (26. 2) $l/d \ll 1$.

Ограничиваясь в полученном уравнении членами второго порядка по l , находим окончательно

$$v(\vec{p} - \vec{p}') = \frac{4\pi}{M} l(p, p') - \frac{(4\pi)^2}{M} P \int d^3k \frac{l(p', k) l(p, k)}{p'^2 - k^2}. \quad (26. 14)$$

26. 4. Уравнение (26. 14) позволяет исключить из всех выкладок истинный потенциал взаимодействия v и заменить его длиной рассеяния l .

Подставим уравнение (26. 14) в (26. 9), взяв $\varepsilon(p) = p^2/2M$. Ограничиваясь членами порядка $(l/d)^2$, достаточно выполнить одну итерацию. В результате получим

$$U(P, \vec{k}, \vec{k}') = -\frac{i}{2} (2\pi)^4 \frac{4\pi}{M} \left\{ l(k, k') - \right. \\ \left. - 4\pi \int d^3q l(k', q) l(k, q) \left[\frac{N(q)}{q^2 + \frac{p^2}{4} - ME - i\delta N(q)} - \right. \right. \\ \left. \left. - P \frac{1}{q^2 - (k')^2} \right] \right\}. \quad (26. 15)$$

При выполнении условия (26. 1) эффективные значения передаваемого импульса малы по сравнению с импульсами частиц. Поэтому величина l фактически не зависит от k, k' . Определяя эффективный потенциал взаимодействия $v_{\text{эфф}}(\vec{k} - \vec{k}')$ из условия

$$U(P, \vec{k}, \vec{k}') = -\frac{i}{2} (2\pi)^4 v_{\text{эфф}}(\vec{k} - \vec{k}'),$$

будем иметь в низшем порядке по l

$$v_{\text{эфф}} = \frac{4\pi}{M} l,$$

откуда эффективный потенциал

$$V_{\text{эфф}}(\vec{r}) = \frac{4\pi}{M} l \delta(\vec{r}). \quad (26. 16)$$

Таким образом, мы возвращаемся к введенному выше псевдопотенциалу*. В § 1 псевдопотенциал вводился в рамках проблемы

* Оператор $1 + r \frac{\partial}{\partial r}$ в низшем порядке разложения по l неэффективен.

двух тел и описывал рассеяние пары частиц в пустоте. Эффекты, связанные с присутствием других частиц системы, могли быть при этом получены лишь на следующем этапе выкладок (при построении теории возмущений). Что же касается эффективного потенциала (26. 15), то он уже включает в себя указанные эффекты (второе слагаемое). Отметим некоторые качественные свойства эффективного потенциала во втором порядке по l . Заменяя l константой во втором члене уравнения (26. 15) и учитывая тождество

$$\int d^3q \left(P \frac{1}{q^2 - k'^2} - P \frac{1}{q^2 - a^2} \right) \equiv 0, \quad (26. 17)$$

где a — любое действительное число, нетрудно видеть, что величина $U(P, \vec{k}, \vec{k}')$ и во втором порядке по l зависит лишь от суммарного импульса P . Таким образом, можно написать

$$V_{\text{эфф}}(\vec{r}) = f(P) \delta(\vec{r}), \quad (26. 18)$$

где $f(P)$ — функция P , которую можно вычислить в явном виде.

26. 5. Заменить истинный потенциал взаимодействия через l следует и в выражениях, отвечающих приближению Хартри — Фока. Для этого понадобится выражение для энергии частицы $\epsilon_{\vec{p}}$.

Величина $\epsilon_{\vec{p}}$ определяется соотношением (см. гл. II)

$$\epsilon_{\vec{p}} = p^2/2M + \frac{g\rho_0^3}{6\pi^2} v(0) - \int d^3p' \theta(p_0^2 - p'^2) v(\vec{p} - \vec{p}')$$

[здесь мы заменили $\int d\xi V$ на $v(0)$]. Вместо v нужно подставить выражение (26. 14). Согласно тождеству (26. 17), величина $v(\vec{p} - \vec{p}')$ не зависит от \vec{p} и \vec{p}' (при $l = \text{const}$). Поэтому можно написать

$$\epsilon_{\vec{p}} = p^2/2M + \frac{2(g-1)\rho_0^3}{3\pi M} l \left(1 - 4\pi l P \int \frac{d^3k}{a^2 - k^2} \right), \quad (26. 19)$$

где a — произвольное число. Мы видим, что закон дисперсии частиц остается квадратичным (с точностью до постоянного слагаемого).

Выражение (26. 19) содержит расходящийся интеграл по k . Однако окончательное выражение, включающее корреляционные эффекты, никаких расходимостей уже не содержит.

Переходим к вычислению массового оператора. С этой целью переведем выражение (25. 5) в импульсное представление

$$M(p) = \frac{4}{(2\pi)^4} \sum_{\mathbf{q}_a} \int_C d^4q G_0(q) \left\{ \Delta \left(q + p, \frac{\vec{q} - \vec{p}}{2}, \frac{\vec{q} - \vec{p}}{2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{i}{4} (2\pi)^4 [v(0) - v(\vec{q} - \vec{p})] \right\} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} \delta_{\mathbf{q}_2 \mathbf{q}_3} \delta_{\mathbf{q}_3 \mathbf{q}_4}$$

Согласно соотношениям (26. 8), (26. 14) и (26. 15), эту величину можно записать в виде

$$M(p) = \frac{32(g-1)i}{M} l^2 \int_C d^4q G_0(q) \times \\ \times \int d^4q' \left[\frac{N(q')}{q'^2 + \frac{(\vec{p} + \vec{q})^2}{4} - M(\zeta + \varepsilon) - i\delta N(q')} - P \frac{1}{q'^2 - a^2} \right],$$

где ζ, ε — четвертые компоненты q', p . Выполняя несложное интегрирование по ζ , получим

$$M(p) = M_0(p) - \frac{32(g-1)}{M} l^2 \int d^3q d^3q' \times \\ \times \left\{ N(q') \frac{N(q') - 1 + 2n_q}{2} \left[(q')^2 + \frac{(\vec{p} + \vec{q})^2}{4} - \varepsilon M - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{q^2}{2} + i\delta(1 - 2n_q - N(q')) \right]^{-1} - n_q P \frac{1}{q'^2 - a^2} \right\}, \quad (26. 20)$$

где

$$M_0(p) = -\frac{8}{3}(g-1) \frac{p_0^3}{M} l^2 P \int \frac{d^3q'}{q'^2 - a^2}$$

в точности компенсируется расходящимся членом выражения (26. 19).

Производя интегрирование по \vec{q} и \vec{q}' , можно прийти к следующему выражению для функции Грина:

$$G^{-1}(\vec{p}, \varepsilon) = \varepsilon - \frac{p^2}{2M} - \frac{2(g-1)p_0^3 l}{3\pi M} - [M(\vec{p}, \varepsilon) - M_0(\vec{p}, \varepsilon)]$$

(величина $M - M_0$ будет приведена ниже).

Вычислим сначала энергию и затухание квазичастиц, приравняв предыдущее выражение нулю. Ограничиваясь учетом членов порядка l^2 , можно вместо ε подставить в $M(\vec{p}, \varepsilon)$ величину $p^2/2M$. Это даст (при $g = 2$)

$$E_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2M} + \frac{2}{3\pi M} p_0^3 l + \frac{2}{15\pi^2 M} p_0^4 l^2 (11 - 2 \ln 2) - \\ - \frac{8}{15\pi^2 M} p_0^3 l^2 (7 \ln 2 - 1) (p - p_0) + \dots \quad (26. 21)$$

Выражение (26. 21) справедливо вблизи $p = p_0$. Величина затухания в этой области имеет вид

$$\Gamma_{\vec{p}} = \frac{1}{\pi M} p_0^4 l^2 (p - p_0)^2 \text{sign}(p - p_0). \quad (26. 22)$$

Это выражение качественно согласуется с общими требованиями, которым должно удовлетворять затухание. Оно действительно оказывается величиной высшего порядка малости вблизи границы Ферми.

Определим химический потенциал системы, пользуясь общим уравнением $\mu = E_{p_0}$. Из соотношения

$$\mu = \frac{p_0^2}{2M} \left[1 + \frac{4}{3\pi} p_0 l + \frac{4}{15\pi^2} (11 - 2 \ln 2) p_0^2 l^2 \right] \quad (26. 23)$$

можно непосредственно вычислить энергию системы, используя $\mu = (\partial E / \partial N)_{\Omega}$. Для этого проинтегрируем выражение (26. 23) по N , учитывая, что $p_0^3 / 3\pi^2 = N / \Omega$. В результате получим

$$E/N = \frac{3}{10} \cdot \frac{p_0^2}{M} \left[1 + \frac{10}{9\pi} p_0 l + \frac{4}{21\pi^2} (11 - 2 \ln 2) p_0^2 l^2 \right]. \quad (26. 24)$$

К аналогичному выражению приводит общая методика, основанная на псевдопотенциале (§ 18) *.

В данном случае теорема о равенстве μ и E/N не выполняется, так как мы рассматриваем газ, не находящийся в «самосжатом» состоянии. Вычисляя $P = -(\partial E / \partial \Omega)_N$, легко убеждаемся, что эта величина не равна нулю.

В заключение вычислим величину скачка в распределении частиц по импульсам Z_p . Для этой цели нам понадобится разложение функции Грина ρ вблизи точек $p = p_0$ и $\varepsilon = \mu$. В этой области величина $M - M_0$ имеет следующий вид:

$$M - M_0 = \frac{1}{\pi^2} \cdot \frac{p_0^4 l^2}{M} \left[\frac{2}{15} (11 - 2 \ln 2) - \frac{8}{15} (7 \ln 2 - 1) \left(\frac{p}{p_0} - 1 \right) - 4 \ln 2 \frac{\varepsilon - \mu}{p_0^2} \right],$$

откуда

$$Z_p = 1 - \frac{4}{\pi^2} (\ln 2) p_0^2 l^2. \quad (26. 25)$$

Эта величина близка к единице, так что распределение $\rho(p)$ близко к фермиевскому.

Подводя общие итоги проведенного рассмотрения, отметим что к тем же результатам, но более коротким путем, приводит использование псевдопотенциала. Если с самого начала заменить истинный потенциал V псевдопотенциалом, то полученные здесь результаты содержатся в собственно энергетической части второго порядка. Мы специально остановились на методике, основанной на суммировании диаграмм теории возмущений, чтобы проиллюстрировать один из эффективных методов полевой теории.

§ 27. ТЕОРИЯ СЖАТЫХ СИСТЕМ МНОГИХ ЧАСТИЦ

27. 1. Переходим к количественному описанию сжатых систем многих частиц, для которых выполнено условие малости среднего расстояния между частицами d по сравнению с эффективным радиусом действия сил R

$$\eta = R/d \gg 1.$$

* Имеется лишь некоторое отличие в численных коэффициентах, связанное с разными значениями фактора вырождения g .

Системы с кулоновским взаимодействием относятся к разряду сжатых при выполнении условия

$$a_0/d \gg 1,$$

где a_0 — боровский радиус частиц.

Будем считать, что величина параметра взаимодействия

$$\alpha \sim MV_0 d^2$$

удовлетворяет условию

$$\eta^{-1} > \alpha > \eta^{-3}.$$

Борновский параметр

$$\alpha' \sim MV_0 R^2 \sim \alpha \eta^2$$

может иметь при этом и большую величину. Для систем с кулоновским взаимодействием большая величина η приводит одновременно к малой величине параметра взаимодействия. Основное уравнение теории сжатых систем, выведенное по результатам § 16 и 25, имеет вид

$$\gamma(1, 2) = V(1, 2) - i \int d^3 d^4 V(1, 3) G_0(3, 4) G_0(4, 3) \gamma(4, 2). \quad (27. 1)$$

27. 2. Переходим к решению уравнения (27. 1), определяющего эффективный потенциал взаимодействия между частицами. Пусть для простоты потенциал является функцией только координат. Ограничиваясь рассмотрением однородных систем, переведем уравнение (27. 1) в импульсное представление

$$\gamma(k) = v(\vec{k}) \left[1 - ig \int d^4 p G_0(p+k) G_0(p) \gamma(k) \right]$$

(g — фактор вырождения, появляющийся при суммировании по дискретным переменным).

В явной форме можно написать

$$\gamma(k) = v(\vec{k}) \left[1 + ig \int d^4 p G_0(p+k) G_0(p) v(\vec{k}) \right]^{-1}. \quad (27. 2)$$

Вычисление входящего сюда интеграла по правилам, изложенным в приложении В, дает

$$\Pi(k) = -ig \int d^4 p G_0(p+k) G_0(p) = -g \int d^3 p \times \\ \times \left\{ \frac{n_p (1 - n_{\vec{p}+\vec{k}})}{-\omega + \varepsilon_{\vec{p}+\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{p}} - i\delta} + \frac{n_{\vec{p}+\vec{k}} (1 - n_p)}{\omega + \varepsilon_{\vec{p}} - \varepsilon_{\vec{p}+\vec{k}} - i\delta} \right\},$$

где ω — четвертая компонента вектора k . Явная зависимость эффективного потенциала γ от этой величины приводит к появлению эффектов запаздывания, обусловленных корреляцией между частицами.

Делая во втором интеграле формулы замену $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \vec{k}$ и затем $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, приходим к окончательной формуле для величины $\Pi(k)$, носящей название поляризационного оператора:

$$\Pi(k) = g \int d^3p n_{\vec{p}+\vec{k}} (1 - n_{\vec{p}}) \times \left(\frac{1}{\varepsilon_{\vec{p}+\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{p}} - \omega - i\delta} + \frac{1}{\varepsilon_{\vec{p}+\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{p}} + \omega + i\delta} \right). \quad (27.3)$$

Явное вычисление этого выражения можно провести, учитывая, что эффективная величина k мала по сравнению с p_0 . Кроме того, можно считать закон дисперсии квадратичным, поскольку обменные эффекты приближения Хартри — Фока играют малую роль.

Условие $k \ll p_0$ приводит к узости эффективной области интегрирования в выражении (27.3). Полагая, что $p = p_0(1 + \alpha)$, где $\alpha > 0$, и учитывая условие $(\vec{p} + \vec{k})^2 < p_0^2$, найдем

$$\alpha < -\frac{kx}{p_0} \text{ и } x < 0,$$

где x — косинус угла между векторами \vec{p} и \vec{k} . Интеграл (27.3) принимает тогда вид

$$\Pi(k) = -\frac{gMp_0}{2\pi^2} f(\zeta^2), \quad (27.4)$$

где

$$f(\zeta^2) = \int_0^1 \frac{dxx^2}{x^2 - \zeta^2 - i\delta}, \quad \zeta \equiv \frac{M\omega}{p_0k}. \quad (27.5)$$

В явной форме

$$f(\zeta^2) = 1 - \frac{\zeta}{2} \ln \left| \frac{1+\zeta}{1-\zeta} \right| - i\pi |\zeta| \theta(1 - |\zeta|). \quad (27.6)$$

Эта функция падает от 1 до $-\infty$ при изменении ζ^2 от 0 до 1 и растет при $\zeta^2 > 1$, имея при $\zeta^2 \rightarrow \infty$ асимптотику $f(\zeta^2) \approx -1/(3\zeta^2)$. Мнимая часть $f(\zeta^2)$ отлична от нуля лишь при $\zeta^2 < 1$.

Предельные значения поляризационного оператора следующие: при $\zeta \rightarrow 0$

$$\Pi(k) = -\frac{2gMp_0}{4\pi^2}; \quad (27.7)$$

при $\zeta \rightarrow \infty$

$$\Pi(k) = \frac{gk^2}{\omega^2 M}, \quad (27.8)$$

где ρ — плотность числа частиц системы.

27. 3. Существенной особенностью выражения для $\gamma(k)$

$$\gamma(k) = \frac{v(\vec{k})}{1 - \Pi(k) v(\vec{k})} \quad (27. 9)$$

является возможность обращения его знаменателя в нуль при действительных значениях ω и \vec{k} . Это обстоятельство отражает факт возникновения новой (коллективной) ветви возбуждений (соответствующие вопросы будут рассмотрены в § 28).

Здесь необходимо обратить внимание на то, что полюс $\gamma(k)$ является формальным препятствием на пути извлечения дальнейшей информации из теории. В самом деле, получение выражений, например, для массового оператора или для энергии предполагает проведение интегрирования по ω и \vec{k} величин, включающих в себя $\gamma(k)$. Поэтому необходимо иметь дополнительные сведения о правилах обхода возникающего полюса. Такие сведения даются спектральным представлением.

Прежде чем переходить к рассмотрению этого вопроса, необходимо исследовать, при каких условиях и где возникает полюс. Исходя из соотношения $1 = \Pi(k) v(\vec{k})$, где v действительно, нетрудно видеть, что реальные корни этого уравнения имеются только при условии действительности $\Pi(k)$. Это в свою очередь требует, чтобы

$$\xi = M\omega/p_0k > 1. \quad (27. 10)$$

Обозначая через $\omega_0(k)$ полюс выражения (27. 9) (он лежит в симметричных точках $\pm \omega_0(k)$), имеем следующее так называемое дисперсионное уравнение:

$$1 = - \frac{gMp_0}{2\pi^2} v(\vec{k}) f(\zeta_0^2), \quad (27. 11)$$

где $\zeta_0 = M\omega_0/p_0k$. Поскольку в области (27. 10) функция $f(\zeta^2)$ отрицательна, уравнение (27. 11) имеет решения только при $v(\vec{k}) > 0$, т. е. при наличии отталкивания между частицами. Этот факт может быть интерпретирован физически следующим образом. Как будет выяснено в § 28, возбуждение, отвечающее рассматриваемому полюсу, можно истолковать как связанное состояние частицы и дырки. Это состояние может возникнуть лишь при наличии сил притяжения между частицей и дыркой. Поскольку частица и дырка имеют противоположный знак соответствующей константы взаимодействия, для образования связанного состояния необходимо, чтобы частицы отталкивались друг от друга.

Рассмотрим сначала короткодействующие силы. В пределе $k \rightarrow 0$ $v(\vec{k})$ стремится к конечной величине $v(0) \sim V_0 R^3$. Поэтому коэффициент при $f(\zeta_0^2)$ в уравнении (27. 11) будет по порядку

величины равен $\alpha\eta^3 \gg 1$ и соответственно $f(\zeta_0^2) \ll 1$. Последнее неравенство указывает на то, что величина ζ_0^2 велика. Поэтому мы приходим к уравнению $1 = \frac{gM\rho_0\nu(0)}{6\pi^2\zeta_0^2}$, откуда

$$\omega_0^2(k) = \frac{g\nu(0)}{M} k^2. \quad (27.12)$$

Этому решению отвечает так называемый нулевой звук [89, 114].

В системе с кулоновским взаимодействием, где $\nu(k) = 4\pi e^2/k^2$, уравнение (27.11) при $k \rightarrow 0$ дает

$$\omega_0^2 \equiv \omega_L^2 = \frac{4\pi Qe^2}{M}, \quad (27.12')$$

где ω_L — частота плазменных колебаний, или лэнгмюровская частота. Существенно, что ω_L не зависит от k в области малых k (оптический спектр). С ростом k в уравнении (27.11) начинает играть роль член, пропорциональный $\rho_0^2 k^2/M^2$. При больших k уравнение (27.11) дает $\omega_0 = \rho_0 k/M$. Однако само уравнение имеет силу лишь для малых k .

Перейдем к установлению правил обхода особенностей функции $\gamma(k)$, предполагая, что уравнение (27.11) имеет действительное решение. Воспользуемся спектральным представлением парной функции Грина, точнее, функции $\tilde{G}(1, 2) = G(1, 2, 1, 2)$. Это представление имеет вид (см. раздел 23.6)

$$\tilde{G}(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dE^2 \frac{\text{Im} \tilde{G}(\vec{p}, E)}{\varepsilon^2 - E^2 + i\delta}.$$

Для нас существенно лишь то, что $\tilde{G}(\vec{p}, \varepsilon)$ зависит от ε только в комбинации $\varepsilon^2 + i\delta$.

Свяжем теперь эффективный потенциал γ с функцией \tilde{G} . Приравняв друг другу аргументы 1, 1' и 2, 2' в уравнении (25.9), найдем

$$\begin{aligned} \tilde{G}(1, 2) - G(1, 1)G(2, 2) + G(1, 2)G(2, 1) = \\ = -i \int d3 d4 G_0(1, 3)G_0(2, 4)\gamma(3, 4)G_0(3, 4, 1, 2). \end{aligned}$$

Переходя в импульсное представление, получим

$$\tilde{G}(p) - \tilde{G}_0(p) = i\gamma(p)\Pi(-p)\Pi(p). \quad (27.13)$$

Здесь мы опустили члены, содержащие интегралы от γ , в которых эффективное значение аргумента γ порядка ρ_0 и велико. $\tilde{G}_0(p)$ — значение $\tilde{G}(p)$ в отсутствие корреляции.

Из уравнения (27.13) следует, что величина $\gamma(p)$ должна фактически зависеть от комбинации $\varepsilon^2 + i\delta$. Рассмотрим с учетом

этого обстоятельства функцию $\gamma(k)$ вблизи ее полюса. Используя уравнение (27. 9) и факт четности $\gamma(k)$ относительно ω , имеем

$$\gamma(k) \approx - \frac{1}{\left(\frac{\partial \Pi}{\partial \omega^2}\right)_{\omega_0^2} \left[\omega^2 - \omega_0^2(\vec{k})\right]}.$$

Совершенно ясно, что для определения правила обхода необходимо заменить ω^2 на $\omega^2 + i\delta$. Тогда точка полюса смещается с действительной оси $\omega_0^2 \rightarrow \omega_0^2 - i\delta$. Поэтому при $\omega_0 < 0$ полюс смещается в верхнюю полуплоскость, при $\omega_0 > 0$ — в нижнюю. Тем самым следующие выкладки приобретают должную степень однозначности.

27. 4. Исследуем эффективный потенциал взаимодействия между частицами

$$\gamma(1, 2) = \int d^4k \gamma(k) \exp\{i[k(1-2)]\}.$$

Этот потенциал обладает свойством запаздывания и характеризуется зависимостью от $t_1 - t_2$, отличной от δ -образной.

Можно ввести некоторый усредненный эффективный потенциал $V_{\text{эфф}}(\vec{r}) \delta(t_1 - t_2)$, который не содержит эффектов запаздывания и в среднем по времени совпадает с γ . Приравнявая интегралы потенциалов γ и $V_{\text{эфф}} \delta(\tau)$ по $\tau = t_1 - t_2$, получим

$$V_{\text{эфф}}(\vec{r}) = \int d\tau \gamma(1, 2) = \int d^3k \gamma(\vec{k}, 0) \exp(i\vec{k}\vec{r}). \quad (27. 14)$$

Для выяснения смысла величины $V_{\text{эфф}}(\vec{r})$ рассмотрим потенциал, создаваемый некоторым статическим заданным распределением частиц (внешний источник) с плотностью $\rho(\vec{r})$. Без учета корреляции этот потенциал имеет вид

$$B(1) = \int d^2V(1, 2) \rho(2),$$

где $V(1, 2)$ — истинный потенциал взаимодействия между частицами. При учете корреляции требуется замена $V \rightarrow \gamma$. Учитывая независимость ρ от времени, находим

$$B(\vec{x}_1) = \int d\vec{x}_2 V_{\text{эфф}}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \rho(\vec{x}_2).$$

Таким образом, $V_{\text{эфф}}$ определяет потенциал статических источников.

Подставляя в выражение (27. 14) значение поляризационного оператора при $\zeta \rightarrow 0$, найдем

$$V_{\text{эфф}}(\vec{r}) = \int d^3k \frac{v(\vec{k}) \exp(i\vec{k}\vec{r})}{1 + \frac{g\rho_0 M}{2\pi^2} v(\vec{k})}. \quad (27. 15)$$

Из этого соотношения вытекают важные физические следствия.

Рассмотрим системы с короткодействующими силами. Пусть расстояния r — меньше радиуса действия сил R , т. е. в выражении (27. 15) $k \gg 1/R$. Тогда, как указывалось в § 16, в ряде интересных случаев потенциал $v(\vec{k})$ может быть записан в форме

$$v(\vec{k}) \sim V_0 R / k^2.$$

Соотношение (27. 15) принимает вид

$$V_{\text{эфф}}(r) \sim V_0 R \frac{\exp(-k_0 r)}{r}, \quad (27. 16)$$

где

$$k_0 \approx (V_0 R \rho_0 M)^{1/2} \sim (\alpha \eta^3)^{1/2} R^{-1}. \quad (27. 17)$$

Поскольку $\alpha \eta^3 \gg 1$, появляется экранирование исходного потенциала взаимодействия. Силы взаимодействия между частицами становятся более короткодействующими и меняют радиус действия от R до значения

$$R_{\text{эфф}} \sim (\alpha \eta^3)^{-1/2} R. \quad (27. 18)$$

Особенно ярко проявляется эта особенность сжатых систем в случае кулоновских сил. При этом $v = \frac{4\pi e^2}{k^2}$ и

$$V_{\text{эфф}} = e^2 \frac{\exp(-k_0 r)}{r}, \quad (27. 19)$$

где *

$$k_0 = 2(\rho_0 / \pi a_0)^{1/2}.$$

В этом случае физическая интерпретация эффекта дебаевского экранирования особенно наглядна. Рассматривая для простоты модель однородного электронного газа с компенсирующим фоном, нетрудно заключить, что каждый из электронов отталкивает от себя другие электроны. Поэтому вблизи электрона образуется избыток положительного заряда, который и экранирует заряд электрона. В результате кулоновские силы становятся короткодействующими.

Если вернуться к первоначальному выражению (27. 9) и записать его в виде

$$v_{\text{эфф}}(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2 \left[1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \Pi(\vec{k}, \omega) \right]},$$

то величину

$$\varepsilon(\omega, \vec{k}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \Pi(\vec{k}, \omega)$$

* Существует некоторая общая формула для радиуса дебаевского экранирования, основанная на применении теоремы Уорда и не связанная со сделанными здесь ограничениями [11].

можно назвать эффективной (продольной) диэлектрической постоянной среды. Эта величина зависит не только от частоты ω , но и от волнового вектора \vec{k} , что свидетельствует о наличии в среде как частотной, так и пространственной дисперсии диэлектрической постоянной. Через $\varepsilon(\omega, \vec{k})$ можно непосредственно выразить целый ряд физических характеристик системы и процессов ее взаимодействия с внешними агентами. Подобная «диэлектрическая» формулировка теории многих частиц активно разрабатывается в последние годы [39, 115].

27. 5. При вычислении таких величин, как массовый оператор, энергия и т. п., приходится сталкиваться с особой математической структурой соответствующих выражений, которую обычно называют логарифмической.

Пусть задан некоторый заведомо сходящийся интеграл, зависящий от малого параметра α

$$I(\alpha) = \int_0^{\infty} dx f(x, \alpha).$$

Пусть далее этот интеграл становится логарифмически расходящимся (на нижнем пределе), если в подынтегральном выражении положить $\alpha = 0$; другими словами, при малых x $f(x, 0) \sim 1/x$. Тогда при $\alpha \rightarrow 0$ величина $I(\alpha)$ является логарифмической функцией, причем при выполнении неравенства $\ln(1/\alpha) \gg 1$ вычисление $I(\alpha)$ существенно упрощается.

В самом деле, допустим, что при значениях x , меньших некоторой не зависящей от α величины x_0 , функция $f(x, \alpha)$ приобретает вид

$$f(x, \alpha) \approx \frac{\varphi(\alpha/x)}{x},$$

где функция φ конечна при нулевом значении своего аргумента (иначе интеграл $I(0)$ не будет логарифмически расходиться) и стремится к нулю, когда аргумент стремится к бесконечности (иначе $I(\alpha)$ не будет сходиться). Разобьем $I(\alpha)$ на сумму двух интегралов. Первый, взятый по области от x_0 до ∞ , стремится при $\alpha \rightarrow 0$ к постоянному пределу

$$\int_{x_0}^{\infty} dx f(x, 0).$$

Второй интеграл

$$\int_0^{x_0} \frac{dx}{x} \varphi(\alpha/x)$$

после подстановки $x = \alpha\xi$ принимает вид

$$\int_0^{\frac{x_0}{\alpha}} \frac{d\xi}{\xi} \varphi(1/\xi).$$

В этом сходящемся интеграле при убывании α существенна лишь область вблизи верхнего предела. Вынося в этой области из-под знака интеграла величину $\varphi(\alpha/x_0) \approx \varphi(0)$, найдем окончательно

$$I(\alpha) = \varphi(0) \ln(x_0/\alpha) + O(\alpha^0). \quad (27.20)$$

Так мы получаем простой ответ, справедливый с логарифмической точностью.

27. 6. Определим массовый оператор сжатой системы. Из соотношения (25. 11) находим

$$\begin{aligned} M(p) &= -i \int d^4k \left[\gamma(k) - v(\vec{k}) \right] G_0(p-k) = \\ &= -i \int d^4k G_0(p-k) \frac{\Pi(k) v^2(\vec{k})}{1 - \Pi(k) v(\vec{k})}. \end{aligned}$$

Ограничимся наиболее важным случаем кулоновской системы. Тогда, вводя

$$\zeta = \frac{M\omega}{p_0 k}, \quad k = p_0 q, \quad \vec{p} = p_0 \vec{x}$$

и

$$\varepsilon = \frac{p_0^2}{2M} y,$$

получим

$$\begin{aligned} M(p) &= 8i \frac{e^2}{a_0} \int \frac{d^3q}{q^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi} \frac{f(\xi^2)}{1 + \frac{k_0^2}{2q^2 p_0^2} f(\xi^2)} \times \\ &\times \left\{ y - 2q\xi - (\vec{x} - \vec{q})^2 + i\delta \operatorname{sign} [(\vec{x} - \vec{q})^2 - 1] \right\}^{-1}. \quad (27.21) \end{aligned}$$

Проанализируем особенности подынтегрального выражения в комплексной плоскости ξ . Прежде всего, придется иметь дело с полюсом функции Грина G_0 , расположенным в точке

$$\xi_1 = \frac{[y - (\vec{x} - \vec{q})^2]}{2q} + i\delta \operatorname{sign} [(\vec{x} - \vec{q})^2 - 1].$$

Далее нужно учесть полюса величины $\gamma(k)$. Они расположены в точках

$$\xi_2 = \begin{cases} \frac{M|\omega_0|}{p_0 k} - i\delta \\ -\frac{M|\omega_0|}{p_0 k} + i\delta \end{cases} \frac{M|\omega_0|}{p_0 k} > 1.$$

Наконец, имеет особенности и сама величина $f(\zeta^2)$. Как видно из ее определения [см. выражения (27. 5) и (27. 6)], имеются точки ветвления $\zeta_3^2 + i\delta = 1$, т. е.

$$\zeta_3 = \begin{cases} 1 - i\delta \\ -1 + i\delta \end{cases}$$

Проводя линии разреза, приходим к изображенной на рис. 63 картине.

Ввиду достаточно быстрого убывания подынтегрального выражения в соотношении (27. 21) с ростом ζ контур интегрирования можно сместить на мнимую ось. При этом придется иметь дело с вычетами полюса ζ_1 , если он лежит в первом или третьем квадранте, т. е. если выполнены условия

$$y > (\vec{x} - \vec{q})^2 > 1$$

или

$$1 > (\vec{x} - \vec{q})^2 > y.$$

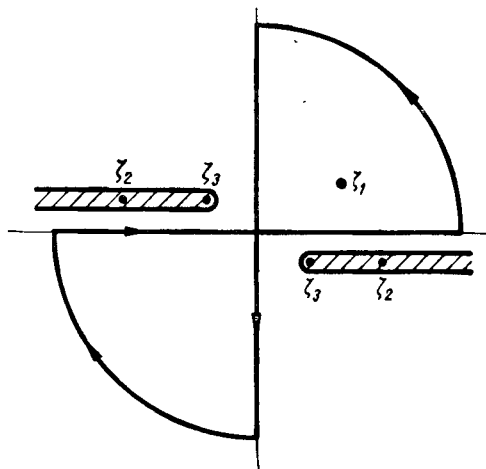


Рис. 63

Интеграл по замкнутому контуру C равен вычету в первом квадранте с положительным знаком или в третьем квадранте с отрицательным знаком. Таким образом, вклад вычетов в интеграл по ζ в выражении (27. 21) равен

$$i \left\{ \theta \left[y - (\vec{x} - \vec{q})^2 \right] - \theta \left[1 - (\vec{x} - \vec{q})^2 \right] \right\} \frac{i \left[\frac{y - (\vec{x} - \vec{q})^2}{4q^2} \right]}{1 + \frac{k_0^2}{2q^2 p_0^2} f}$$

При $y - x^2 > k_0/p_0$ аргумент функции f велик, и сама функция пропорциональна q^2 . Поэтому логарифмическая ситуация отсутствует, и вклад вычетов может не учитываться. В другом предельном случае ($y \approx 1$) вклад вычетов также крайне мал из-за узости области интегрирования по \vec{q} .

Опуская поэтому вычеты, мы можем заменить исходный интеграл интегралом по мнимой оси, т. е. сделать замену $\zeta \rightarrow i\zeta$. Функция $f(\zeta^2)$ принимает при этом вид

$$f(-\zeta^2) = 1 - \zeta \operatorname{arctg}(1/\zeta).$$

Таким образом, входящий в соотношение (27. 21) интеграл по ζ можно представить в виде

$$I = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\zeta}{2\pi} \cdot \frac{1 - \zeta \operatorname{arc\,tg}(1/\zeta)}{1 + \frac{k_0^2}{2q^2 p_0^2} [1 - \zeta \operatorname{arc\,tg}(1/\zeta)]} \times \\ \times \left[y - 2iq\zeta - (\vec{x} - \vec{q})^2 \right]^{-1}.$$

Рассмотрим случай $y - x^2 \gg k_0/p_0$. Малым параметром здесь является величина k_0/p_0 . Если ею пренебречь, то при $q \rightarrow 0$ $I \rightarrow \text{const}$ и имеет место типичная логарифмическая ситуация. Согласно соотношению (27. 19), при этом

$$M(p) = -\frac{4e^2}{\pi^2 a_0} (y - x^2)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\zeta}{2\pi} [1 - \zeta \operatorname{arc\,tg}(1/\zeta)] \ln(p_0/k_0)$$

или, вычисляя интеграл и переходя к обычным обозначениям,

$$M(p) = -\frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{e^2}{a_0} \cdot \frac{p_0^2}{M} \cdot \frac{\ln(p_0/k_0)}{\varepsilon - p^2/2M}. \quad (27. 22)$$

Мы не будем останавливаться на дальнейшем исследовании массового оператора *. Отметим лишь, что в сжатых системах отличие квазичастицы от истинной частицы в целом незначительно.

27. 7. Вычислим энергию сжатой системы. Переводя для этого соотношение (25. 12) в импульсное представление, найдем

$$E - E_0 = \Omega \frac{g^2}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} [\gamma(k) - \lambda\nu(k)] \int d^4 p G_0(p+k) G_0(p).$$

Вспоминая определение оператора $\Pi(k)$, можно написать

$$E - E_0 = -\frac{i\Omega g}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4 k \frac{|\lambda\nu(k) \Pi(k)|^2}{1 - \lambda\nu(k) \Pi(k)}. \quad (27. 23)$$

Здесь мы всюду заменили ν на $\lambda\nu$.

Заменяв $\Pi(k)$ его выражением из соотношения (27. 5), переведем интеграцию на мнимую ось. При этом в отличие от рассмотренного в разделе 27. 6 примера, никакого вопроса о вычетах не возникает, и мы получаем

$$E - E_0 = \frac{\Omega g p_0}{2M} \int d^3 k k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\zeta}{2\pi} [Q - \ln(1+Q)], \quad (27. 23')$$

где

$$Q = \frac{gM p_0 \nu(k)}{2\pi^2} \left[1 - \zeta \operatorname{arc\,tg}\left(\frac{1}{\zeta}\right) \right].$$

* Исследование массового оператора проводится в работах [116, 117].

Это соотношение для частного случая кулоновых сил было впервые получено Гелл—Манном и Бракнером [118].

Рассмотрим его в этом частном случае, полагая $g = 2$ и $v(\vec{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2}$. Величина Q примет вид

$$Q = \frac{k_0^2}{2k^2} [1 - \zeta \operatorname{arctg}(1/\zeta)]. \quad (27.24)$$

Функция $\frac{Q - \ln(1+Q)}{Q^2}$ совпадает с функцией $f(x)$, о которой шла речь в § 16. При малых Q функция стремится к константе, при больших — к Q^{-1} .

Подстановка выражения (27.24) в (27.23') приводит к типичной логарифмической ситуации: при стремлении k_0^2 к нулю возникает логарифмический интеграл $\int \frac{dk}{k}$. Применение соотношения (27.20) дает *

$$E - E_0 = -N \frac{e^2}{\pi^2 a_0} (1 - \ln 2) \ln(a_0 \rho_0), \quad (27.25)$$

где N — число частиц.

Необходимо специально подчеркнуть аномальную малость численного коэффициента в этой формуле, равного всего трем сотым. Это обстоятельство позволяет думать, что малость корреляционных эффектов представляет собой свойство и не сильно сжатых систем, у которых параметр η незначительно превышает единицу.

В случае однородных кулоновских систем можно найти нелогарифмический член в выражении для $E - E_0$. Общая формула имеет вид [118]

$$E - E_0 = -N [0,0311 \ln(a_0 \rho^{1/3}) + 0,0628] \frac{e^2}{a_0}. \quad (27.26)$$

Отрицательный знак корреляционной поправки к энергии находится в соответствии с вариационным принципом (см. § 7).

В литературе неоднократно предлагались различные интерполяционные формулы для $E - E_0$, позволяющие охватить широкий интервал сжатий [119]. Отправной точкой большинства этих рассмотрений было исследование Вигнера [41], касающееся разреженного электронного газа (см. § 6).

Найдем пределы применимости полученных соотношений. Выше уже говорилось об ограничениях на степень сжатости системы. Рассмотрим другую сторону этого вопроса.

* Вычисление появляющегося интеграла $\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta [1 - \zeta \operatorname{arctg}(\frac{1}{\zeta})]^2$ проще всего проводить, используя параметрическую формулу (27.5) с заменой ζ^2 на $-\zeta^2$.

Полученные результаты относятся лишь к идеализированной однородной модели, отвечающей бесконечному однородному распределению электронного газа и компенсирующего заряда. В природе таких систем не существует*. Поэтому важно выяснить, в какой степени неоднородность в распределении частиц может повлиять на полученные результаты. Исходя из проведенного в § 16 рассмотрения, можно сказать, что необходимым условием применимости соотношения (27. 25) является неравенство

$$x_0 k_0 \gg 1, \quad (27. 27)$$

где x_0 — характерная длина неоднородности; k_0 — импульс Дебая.

Это условие нарушается, например, в применении к несжатому атому (см. § 16), для которого $x_0 \sim a_0 Z^{-1/3}$ и $k_0 \sim a_0 Z^{1/3}$. Интересно рассмотреть с этой точки зрения сжатое вещество. С увеличением сжатия распределение частиц становится все более однородным и можно ожидать, что при достаточных сжатиях условие (27. 27) окажется выполненным. Результаты § 6 показывают, что в областях давления II и III распределение граничного импульса $p_0(x)$ дается соотношением

$$p_0(x) \sim \varrho^{1/3} \left[1 + \frac{Z^{2/3}}{\varrho^{1/3} a_0} f\left(\frac{x \varrho^{1/3}}{Z^{1/3}}\right) + \dots \right].$$

Отсюда

$$x_0 \sim p_0 / \nabla p_0 \sim a_0 Z^{-1/3} \gg k_0^{-1}.$$

Однако в сжатом веществе имеется еще одна характерная длина неоднородности x_0 , определяемая лапласианом граничного импульса. Согласно соотношению (5. 14) для этой величины произведение $x_0 k_0$ порядка единицы, и условие (27. 27) нарушается при любых сколь угодно больших сжатиях. Тем не менее, учитывая быстрое уменьшение численных коэффициентов при квантовых поправках (см. § 5), можно для оценки использовать «квазиоднородное» выражение

$$E - E_0 = - \frac{e^2}{\pi^2 a_0} (1 - \ln 2) \int d\vec{x} \varrho(x) \ln \left[a_0 \varrho^{1/3} \left(\frac{\vec{x}}{x} \right) \right]. \quad (27. 25')$$

Существенный интерес представляет корреляционный вклад в давление. Дифференцируя соотношение (27. 25) по Ω при постоянном N [$p_0 \sim (N/\Omega)^{1/3}$], находим [120]:

$$P - P_0 = - \frac{1 - \ln 2}{3\pi^2} \cdot \frac{e^2}{a_0} \varrho. \quad (27. 28)$$

Эта величина мала даже по сравнению с квантовыми и обменными поправками к давлению.

* В плазме, где осуществляется однородное распределение, весьма существенны корреляции тяжелых частиц.

27. 8. Применим выражение для корреляционной энергии сжатой системы (27. 23) к системам с короткодействующими силами [75]. Учитывая необходимость включить в рассмотрение силы, зависящие от спина и изотопического спина, следует несколько видоизменить это выражение. Возвращаясь к выражениям (27. 1), (27. 2) и учитывая, что в случае заполненных оболочек поляризационный оператор диагонален относительно дискретных индексов, мы можем считать матричную структуру истинного и эффективного потенциалов взаимодействия одинаковой. Это относится к интересующему нас случаю серберовских сил. В самом деле, оператор $S = \frac{1}{2} (1 - \mathcal{P}_\sigma \mathcal{P}_\tau)$ обладает свойством $S^2 = S$. Поэтому, заменяя $\gamma \rightarrow \gamma S$, $V \rightarrow VS$, мы приходим к соотношению типа (27. 2), в котором операторы S стоят лишь в левой его части и в числителе правой; из знаменателя оператор S исключается. Это обстоятельство, сильно упрощающее выкладки, приводит к тому, что величина Q в выражении (27. 23') сохраняет свой вид (величина g для ядерного вещества должна быть равна 4). Изменение коснется лишь общего коэффициента выражения для $E - E_0$, в котором вместо g нужно подставить величину $S\rho_{\sigma\tau}$ (S^2) = 3/2.

Таким образом, общее выражение для корреляционной энергии сжатой системы частиц двух сортов, связанных короткодействующими силами (ядерной материи), имеет вид

$$\left. \begin{aligned} E - E_0 &= \frac{3}{4} \frac{\Omega \rho_0}{M} \int d^3k k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\zeta}{2\pi} [Q - \ln(1 + Q)], \\ Q &= \frac{2M\rho_0}{\pi^2} v(k) \left[1 - \zeta \arctg\left(\frac{1}{\zeta}\right) \right]. \end{aligned} \right\} (27. 29)$$

Проанализируем вклад в интеграл по k различных областей изменения переменной k , предполагая выполненным условие $a\eta < 1$. Введем импульс Дебая рассматриваемой системы, определяемый выражением (27. 17)

$$k_0 \sim (V_0 R \rho_0 M)^{1/2} \ll \rho_0.$$

В области интегрирования по k от нуля до $1/R$ $v(\vec{k}) \sim V_0 R^3$ и величина $Q \sim a < 1$. Поэтому вклад этой области в энергию по порядку величин относительно мал и равен $\frac{\Omega \rho_0}{MR^4}$.

В области $k > 1/R$ фурье-образ потенциала имеет в наиболее интересных случаях следующий вид:

$$v(k) = \frac{C}{k^2}, \quad C \sim V_0 R.$$

Приведем значения C для наиболее важных потенциалов. Потенциалу Юкава $V(r) = V_0 \frac{\exp(-r/R)}{r/R}$ отвечает $v(\vec{k}) = \frac{4\pi V_0 R^3}{1 + (kR)^2}$

и $C = 4\pi V_0 R$. Для потенциальной ямы $V(\vec{r}) = -V_0$ ($r < R$), $V(\vec{r}) = 0$ ($r > R$) имеем

$$v(\vec{k}) = \frac{4\pi V_0 R^3}{kR} \cdot \frac{\partial}{\partial(kR)} \left(\frac{\sin(kR)}{kR} \right).$$

При больших kR v переходит в $4\pi V_0 R^3 \frac{\cos(kR)}{(kR)^2}$. Эта величина не имеет требуемого вида, однако ее квадрат* может быть представлен в виде $v^2(k) = \frac{8\pi^2 V_0^2 R^6}{k^4}$. Здесь использовано соотношение $\cos^2 x \rightarrow 1/2$ при $x \rightarrow \infty$, которое нужно понимать в смысле обобщенных функций. Таким образом, можно положить $C = 2\sqrt{2}\pi V_0 R$. В области $1/R < k < k_0$ величина Q имеет оценку $Q \sim \frac{M p_0 c}{k^2} \sim \frac{k_0^2}{k^2} \gg 1$. Логарифмом в выражении (27. 29) можно пренебречь, и мы приходим к оценке вклада $E - E_0$ в этой области:

$$E - E_0 \sim \frac{\Omega p_0 k_0^4}{M}.$$

Этот вклад также оказывается с логарифмической точностью малым.

Наконец, в области $k_0 < k < p_0$ (значения k , бóльшие p_0 , рассматривать не следует) имеем

$$Q \sim k_0^2/k^2 \ll 1.$$

Функцию $Q - \ln(1 + Q)$ можно разложить в ряд по Q , ограничиваясь первым членом $Q^2/2$, и мы получим выражение

$$E - E_0 = -\frac{3}{8} \frac{\Omega p_0}{M} \cdot \frac{2M^2 p_0^2}{\pi^6} \int_{k_0}^{p_0} \frac{dk}{k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi} \left[1 - \zeta \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left(\frac{1}{\zeta} \right) \right]^2.$$

Выполняя интегрирование, находим

$$E - E_0 = -N \frac{3(1 - \ln 2)}{128\pi^4} C^2 M \ln \left(\frac{p_0}{M V_0 R} \right). \quad (27. 30)$$

Для потенциальной ямы

$$E - E_0 = -N \frac{3}{16\pi^2} (1 - \ln 2) M V_0^2 R^2 \ln \left(\frac{p_0}{M V_0 R} \right). \quad (27. 31)$$

27. 9. Перейдем к обоснованию той модели ядерного вещества, которая рассматривалась в § 7 и 18 [38]**. Напомним, что в рам-

* Из соотношения (27. 29) видно, что существенны только четные степени v и именно — вторая.

** Близкие вопросы исследовались также в работе [117].

ках этой модели нуклоны испытывают непосредственную корреляцию лишь за счет короткодействующих сил отталкивания $V_{(c)}$. Дальнедействующие силы притяжения $V_{(a)}$ проявляются только в виде общей потенциальной ямы и измененного закона дисперсии нуклонов.

Переходя на язык операторов, можно сказать, что целью проводимого рассмотрения является обоснование замены точного гамильтониана системы

$$H = H_F + H_{(c)} + H_{(a)},$$

($H_{(a, c)}$ — гамильтонианы, отвечающие соответственно силам $V_{(a)}$ и $V_{(c)}$) приближенным

$$H = H_{0(a)} + H_{(c)},$$

где $H_{0(a)}$ — гамильтониан приближения Хартри—Фока, учитывающий только силы притяжения.

При отсутствии гамильтониана отталкивания $H_{(c)}$ возможность указанной выше замены можно проверить непосредственно. В этом случае дело сводится к проверке малости корреляционных эффектов, обусловленных только силами притяжения. Подстановка в выражение (27. 31) принятых значений параметров V_0 , R и p_0 (см. § 1) приводит к следующей оценке *:

$$\frac{E - E_0}{N} \approx -1 Mэв. \quad (27. 32)$$

Эта величина мала даже по сравнению с энергией связи ядерной материи.

Теперь необходимо показать, что присутствие сил короткодействия $H_{(c)}$ не препятствует замене гамильтониана $H_F + H_{(a)}$ на $H_{0(a)}$. Задача сводится к учету интерференции корреляций, обусловленных силами $V_{(c)}$ и $V_{(a)}$. Эта интерференция не может быть значительной. В самом деле, корреляционные эффекты, обусловленные теми и другими силами, по отдельности малы. Для сил $V_{(a)}$ существенно влияние принципа Паули (см. § 16), характеризующее большой величиной параметра сжатости η . Малость корреляционных эффектов сил отталкивания обусловлена малой величиной длины рассеяния s по сравнению с расстоянием между частицами. Интерференционный эффект должен в значительной степени определяться произведением указанных параметров малости. Расчет подтверждает эти соображения [39] и дает поправку к энергии порядка $-1 Mэв$.

Таким образом, рассмотренная модель ядерного вещества справедлива (в энергетическом смысле) с точностью до нескольких миллионов электронвольт. Эффекты неучтенных трехчастичных корреляций [см. выражение (26. 3)] дают величину того же порядка, но обратного знака.

* В рассматриваемом случае параметр $\alpha\eta$ не мал по сравнению с единицей. Однако это обстоятельство не меняет порядка приведенной оценки.

Вернемся к общей проблеме устойчивости ядерных конфигураций (см. § 7). Рассмотрим уравнение состояния сильно сжатого ядерного вещества, предполагая сначала, что силы типа «твердой сердцевин» отсутствуют. Энергия такой системы определяется, во-первых, выражением (7. 31), отвечающим приближению Хартри-Фока, и, во-вторых, корреляционным членом (27. 31), вклад которого в давление совершенно ничтожен.

Полученные в § 7 результаты выходят за рамки приближения Хартри-Фока и дают не только достаточный, но и необходимый критерий, неустойчивости ядерного вещества. Вывод о том, что в сильно сжатом ядерном веществе роль кинетической энергии относительно мала, полностью подтверждается. В литературе нередко приводится противоположное утверждение, подкрепляемое ссылкой на системы с кулоновским взаимодействием. Эта аналогия, однако, неправомерна, поскольку из-за электрической нейтральности в целом в кулоновских системах происходит полное выпадение основной части энергии, отвечающей самосогласованному взаимодействию.

Потенциал «твердой сердцевин» радикально меняет проблему устойчивости. Уравнение состояния ядерного вещества с учетом этого потенциала в области высоких сжатий исследовалось в нескольких работах [69, 121]. Однако правильность самого представления о непроницаемых шарах ограничена рамками не слишком высоких сжатий.

Это относится ко всем вопросам, касающимся сильно сжатого ядерного вещества. Не вызывает сомнения, что при достаточно высоких сжатиях в игру вступят значительные по величине многочастичные силы, зависящие к тому же от состояния взаимодействующих нуклонов. Это обстоятельство крайне затрудняет исследование соответствующего круга вопросов.

§ 28. ПРИЛОЖЕНИЯ К ТЕОРИИ КОЛЛЕКТИВНЫХ КОЛЕБАНИЙ

28. 1. Рассмотрим пример, иллюстрирующий применение метода функций Грина к проблеме описания возбужденных состояний системы.

Возьмем систему частиц с кулоновским взаимодействием и предположим, что она сжата. Сжатая система с кулоновским взаимодействием характеризуется малой величиной этого взаимодействия ($\alpha \sim \eta^{-2}$). Поэтому при возбуждении такой системы без изменения числа частиц в ней всегда возможен переход системы в такое возбужденное состояние, которое отвечает просто рождению пары — частицы и дырки — с несущественным взаимодействием между ними.

Особенность таких возбужденных состояний состоит в том, что возбуждение затрагивает малое число частиц системы, в данном случае только одну. Поэтому мы будем называть эти состояния

индивидуальными. Спектр индивидуальных возбужденных состояний системы может быть найден следующим образом. На основе результатов § 21 можно положить

$$\Delta E_n = \varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu.$$

Здесь частица, приобретая энергию, попадает в состояние ε_ν , освобождая при этом место в состоянии ε_μ . В пространственно-однородной системе состояния характеризуются импульсом частиц. Если $\vec{p} + \vec{k}$ — импульс состояния ν , \vec{p} — состояния μ , то

$$\Delta E_n = \frac{(\vec{p} + \vec{k})^2 - p^2}{2M}.$$

Величина \vec{k} отвечает импульсу, который приобретает система при возбуждении. Поскольку величина $p^2/2M$ ограничена сверху энергией Ферми $p_0^2/2M$, область спектра индивидуальных возбуждений имеет верхнюю и нижнюю границы $\frac{p_0 k}{M} + \frac{k^2}{2M}$ и $-\frac{p_0 k}{M} + \frac{k^2}{2M}$ соответственно. На рис. 64 эта область заштрихована.

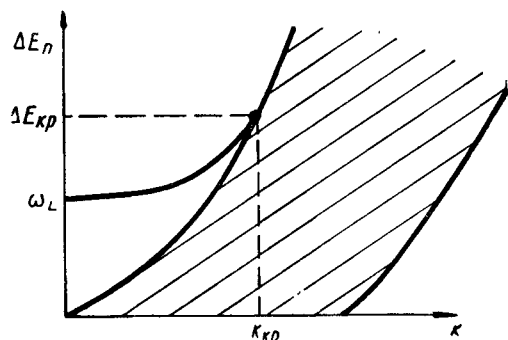


Рис. 64

Энергетический спектр системы со слабым взаимодействием отнюдь не ограничивается уровнями, отвечающими индивидуальному возбуждению системы. Имеются еще так называемые коллективные уровни. Соответствующее им состояние системы характеризуется совместным возбуждением большого числа частиц системы. В классической области коллективные возбуждения проявляются как некие волны, распространяющиеся по системе; поэтому, говоря об этих состояниях, употребляют термин коллективные колебания.

Коллективные возбужденные состояния системы широко исследовались в связи с проблемами продольных колебаний плазмы, дискретных потерь и рентгеновского поглощения в металлах, нулевого звука в конденсированных системах, гигантского резонанса в фотоядерных реакциях и др.

Коллективная ветвь возбуждения представляет собой «дополнительную» ветвь, которой лишен спектр идеального газа. Именно взаимодействие, точнее говоря, корреляция между частицами, является той причиной, которая делает возможным появление коллективных, согласованных движений частиц системы. При

выключении взаимодействия коллективное возбужденное состояние переходит в индивидуальное (механизм этого перехода будет рассмотрен ниже).

28. 2. Переход системы в коллективное возбужденное состояние можно интерпретировать как рождение квазичастицы, представляющей собой связанное состояние частицы и дырки *. Волновая функция такого состояния может быть представлена в виде суперпозиции волновых функций, отвечающих индивидуальным возбуждениям различных частиц системы. Это обстоятельство и служит отражением коллективного характера рассматриваемого состояния **.

Коллективные уровни энергии существуют далеко не во всех системах. К числу условий, выполнение которых необходимо для появления таких уровней, относится прежде всего требование о преобладании сил отталкивания между частицами системы. Выполнение этого условия гарантирует существование сил притяжения между частицей и дыркой.

Далее, в разреженной системе силы взаимодействия между частицами не могут привести к появлению согласованных движений большого числа частиц (в таких системах существенны лишь парные корреляции между частицами). И даже если движение такого рода в какой-то момент искусственно создано, спустя короткое время оно перейдет в совокупность не связанных между собой индивидуальных движений. Таким образом, вторым условием существования коллективных уровней является сжатость системы, т. е. наличие сравнительно большого числа частиц в сфере действия каждой из них.

Волновая функция коллективного возбужденного состояния системы имеет вид следующей суперпозиции:

$$\Psi_n(N) = \sum_p \left[\alpha_{p, \vec{k}} a_{p+k, \vec{k}}^\dagger b_{p, \vec{k}}^\dagger + \alpha'_{p, \vec{k}} b_{p+k, \vec{k}} a_{p, \vec{k}} \right] \Psi, \quad (28. 1)$$

где α , α' — некоторые коэффициенты [95]. Если теперь рассмотреть зависимость этих коэффициентов от \vec{k} — суммарного импульса квазичастицы, то окажется, что с ростом \vec{k} относительная величина одного из коэффициентов $\alpha_{p, \vec{k}}$ увеличивается за счет остальных. При некотором определенном значении $k = k_{кр}$ (см. рис. 64) остается только этот коэффициент, и квазичастица, как говорят, «раздевается», превращаясь в индивидуальное возбуждение. Значит, необходимо рассматривать лишь сравнительно длинноволновые возбуждения, для которых

$$k < k_{кр}. \quad (28. 2)$$

* Точнее, нужно говорить о состоянии системы частица — дырка с дискретным уровнем энергии.

** Здесь и ниже речь будет идти о коллективных возбуждениях, отвечающих одной связанной паре. В принципе возможно образование и более сложных комплексов.

В неоднородной системе сама величина k не является определенной ввиду обмена импульсом между квазичастицей и неоднородностями системы. Мерой величины этого обмена может служить обратная длина неоднородности $1/x_0$, где x_0 — расстояние, на котором характеристики системы меняются заметным образом. Поэтому при нарушении условия

$$k_{кр} - k > 1/x_0 \quad (28.3)$$

имеется конечная вероятность перехода квазичастицы в индивидуальное возбуждение. Есть и другие причины, по которым рассматриваемая квазичастица может оказаться неустойчивым образованием. Необходимо, чтобы соответствующее затухание было мало по сравнению с самой величиной ΔE_n^* .

28. 3. Переходим к количественному описанию коллективных колебаний. Поскольку квазичастица образована из пары частица — дырка, следует рассмотреть величину

$$\Phi_n(1, 2) = \langle \Psi | T(\Psi_r^-(1) \Psi_r^+(2)) | \Psi_n \rangle,$$

которая в случае сжатой системы определяется уравнением (25. 15)

$$\begin{aligned} \Phi_n(1, 2) = \bar{\Phi}_n(1, 2) - \\ - i \int d^3 d^4 G_0(1, 3) G_0(3, 2) V(3, 4) \Phi_n(4, 4). \end{aligned} \quad (28.4)$$

Функция $\bar{\Phi}_n(1, 2)$ описывает распространение не коррелированных друг с другом частицы и дырки и не имеет отношения к их связанному состоянию. Поэтому мы можем ограничиться рассмотрением однородного интегрального уравнения.

Функция $\Phi_n(1, 2)$ характеризуется следующей зависимостью от времени:

$$\Phi_n(1, 2)|_{t_2-t_1 \rightarrow 0} = \exp(-i\Delta E_n t_1) \Phi_n(q_1, q_2).$$

Подстановка этого выражения в уравнение (28. 4) приводит с учетом $V(3, 4) = V(q_3, q_4) \delta(t_3 - t_4)$ к следующему интегральному уравнению для функции $\Phi_n(q_1, q_2)$:

$$\begin{aligned} \Phi_n(q_1, q_2) = -i \int dq_3 dq_4 \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0(q_1, q_3, \varepsilon) G_0(q_3, q_2, \varepsilon - \Delta E_n) \times \\ \times V(q_3, q_4) \Phi_n(q_4, q_4). \end{aligned} \quad (28.5)$$

Если положить $q_1 = q_2$, то получится уравнение

$$\begin{aligned} \Phi_n(q_1, q_1) = -i \int dq_3 dq_4 V(q_3, q_4) \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0(q_1, q_3, \varepsilon) \times \\ \times G_0(q_3, q_1, \varepsilon - \Delta E_n) \Phi_n(q_4, q_4), \end{aligned} \quad (28.6)$$

которое при наложении определенных граничных условий может служить для нахождения спектра возбуждений ΔE_n .

* Говоря о затухании, мы имеем в виду не истинно стационарное состояние системы, а то состояние, которое возникает при определенном механизме возбуждения системы, приводящем к рождению одной квазичастицы (см. § 22, 24).

Полученные уравнения сильно упрощаются в случае пространственно-однородной системы. Будем рассматривать функцию $\Phi_n(q_1, q_2)$ вида *

$$\Phi_n(q_1, q_2) = \int d^3p \varphi(\vec{p}, \vec{k}) \exp \left\{ i \left[(\vec{p} + \vec{k}) \vec{x}_1 - \vec{p} \vec{x}_2 \right] \right\} \delta_{\sigma_1 \sigma_2}. \quad (28.7)$$

Здесь $\vec{p} + \vec{k}$ — импульс частицы; \vec{p} — импульс дырки; \vec{k} — суммарный импульс квазичастицы. Подстановка выражения (28.7) в (28.5) дает

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{p}, \vec{k}) = & -2iv(\vec{k}) \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0(\vec{p}, \varepsilon) G_0(\vec{p} + \vec{k}, \varepsilon + \Delta E_n) \times \\ & \times \int d^3p' \varphi(\vec{p}', \vec{k}). \end{aligned} \quad (28.8)$$

Интегрируя обе части этого уравнения по \vec{p} и учитывая определение поляризационного оператора, получим

$$\left[1 - \Pi(\vec{k}, \Delta E_n) v(\vec{k}) \right] \int d^3p \varphi(\vec{p}, \vec{k}) = 0. \quad (28.9)$$

Таким образом, искомое значение энергии возбуждения является одновременно полюсом эффективного потенциала и полюсом парной функции Грина.

Корни уравнения $1 = \Pi v$ были исследованы в предыдущем параграфе, где величина ΔE_n обозначалась через $\omega_0(\vec{k})$. На рис. 64 представлен ход зависимости ΔE_n от k . В области k , близких к $k_{кр}$, мы использовали более точное выражение для поляризационного оператора, в котором сохранены члены $k^2/2M$. Это выражение имеет следующий вид [95]:

$$\Pi(\vec{k}, \omega) = \frac{M^3}{4\pi^2 k^3} \left\{ \Delta_1 \Delta_2 \ln \frac{\Delta_1}{\Delta_2} + \Delta_3 \Delta_4 \ln \frac{\Delta_3}{\Delta_4} - 2 \frac{k^3 \rho_0}{M^2} \right\}, \quad (28.10)$$

где

$$\Delta_{1,2} = \omega \mp \frac{k\rho_0}{M} - \frac{k^2}{2M},$$

$$\Delta_{3,4} = \omega \pm \frac{k\rho_0}{M} + \frac{k^2}{2M}.$$

Положение критической точки $k_{кр}$ определяется пересечением кривой ΔE_n , отвечающей уравнению (28.9), и кривой, соответствующей верхней границе зоны индивидуальных возбуждений. При этом возникают следующие уравнения:

$$\left(\frac{k_{кр}}{\rho_0} \right)^2 = \frac{1}{\pi a_0 \rho_0} \left[\left(2 + \frac{k_{кр}}{\rho_0} \right) \ln \left(1 + \frac{2\rho_0}{k_{кр}} \right) - 2 \right],$$

$$\frac{\Delta E_{кр}}{\omega_L} = \left(\frac{3\pi a_0 \rho_0}{4} \right)^{1/2} \left(\frac{k_{кр}}{\rho_0} + \frac{k_{кр}^2}{2\rho_0^2} \right).$$

* То обстоятельство, что спины частицы и дырки одинаковы, свидетельствует о равенстве нулю полного спина квазичастицы.

Приведенные соотношения справедливы, если $k_{кр}$, а вместе с ним и k мало по сравнению с граничным импульсом p_0 . С ростом p_0 величина $k_{кр}$ растет, но слабее, чем p_0 ; при не слишком высоких сжатиях $k_{кр}$ порядка импульса Дебая.

Величина $\Delta E_{кр}$ в общем незначительно превышает лэнгмюровскую частоту ω_L . Поэтому коллективному уровню отвечает сравнительно узкая область спектра.

В рассмотренном частном случае однородной системы затухание оказывается точно равным нулю*. Поэтому фактически решена задача не только о поведении квазичастицы, но и о нахождении истинного возбужденного уровня энергии. $\Delta E_{кр}$

При выключении взаимодействия коллективное возбуждение переходит в одночастичное. Интересно проследить механизм этого перехода. Обратимся с этой целью к рис. 65 и рассмотрим квазичастицу с определенным импульсом k (точка 1). При мысленном уменьшении заряда электронов e вся коллективная ветвь опускается вниз, как это легко видеть из выражений для ω_L и $\Delta E_{кр}$; соответственно уменьшается и энергия квазичастицы.

При некотором определенном значении e коллективная кривая пройдет через точку 2, лежащую на верхней границе индивидуальной зоны. При этом никакой разницы между коллективным и индивидуальным возбуждением нет. При еще меньших значениях e остается лишь индивидуальное возбуждение. Аналогично, но в обратном порядке происходит образование квазичастицы при включении взаимодействия.

28. 4. В случае коллективных колебаний неоднородных систем следовало бы исходить из общих уравнений (28. 5) и (28. 6). Однако это привело бы к весьма громоздким выкладкам [78]. Мы ограничимся рассмотрением слабонеоднородных систем [94].

Если выполнено условие

$$x_0 k_0 \gg 1,$$

где x_0 — характерная длина неоднородности, то возможна «квазиоднородная» формулировка задачи, т. е. можно пренебречь градиентами величин, характеризующих распределения по системе.

* Этот вывод справедлив с точностью до малых (в случае сжатой системы) членов, описывающих распад квазичастицы на два индивидуальных возбуждения.

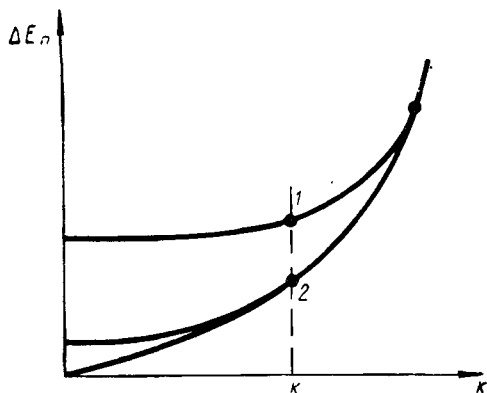


Рис. 65

Рассмотрим с этой точки зрения уравнение (28. 6). Подставляя в него выражения для функций Грина в квазиклассическом приближении, можно написать

$$\Phi_n(\vec{x}_1) = \int d^3k v(\vec{k}) \Pi[\vec{k}, \Delta E_n, \rho_0(\vec{x}_1)] \int d\vec{x}_2 \Phi_n(\vec{x}_2) \exp(-i\vec{k}\vec{x}),$$

где $\Phi_n(\vec{x}_1) \equiv \Phi_n(q_1, q_1)$, $\vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$.

Здесь мы явно выделили в поляризационном операторе зависимость граничного импульса от точки \vec{x}_1 .

Нетрудно проверить, что это уравнение эквивалентно следующему:

$$\Phi_n(\vec{x}_1) = v(-i\nabla_1) \Pi(-i\nabla_1, \Delta E_n, \rho_0(x_1)) \Phi_n(\vec{x}_1), \quad (28. 11)$$

где мы формально заменили \vec{k} на оператор $-i\nabla_1$, который действует только на функцию $\Phi_n(\vec{x}_1)$.

С учетом слабого изменения функции $\rho_0(x)$ полученное уравнение можно заменить следующим:

$$[\Delta + k^2(x)] \Phi_n(\vec{x}) = 0, \quad (28. 12)$$

где величина $k(x)$, имеющая смысл переменного в пространстве волнового вектора квазичастицы, получается из уравнения

$$1 = v[k(x)] \Pi[k(x), \Delta E_n, \rho_0(x)] \quad (28. 13)$$

и зависит от энергии возбуждения ΔE_n , которая определяется уравнением (28. 12) с соответствующими граничными условиями.

Для доказательства следует учесть, что поляризационный оператор является четной функцией k , т. е. зависит фактически лишь от k^2 . Поэтому подстановка в уравнение (28. 11) вместо Φ_n решения уравнения (28. 12) приводит с учетом соотношения (28. 13) к тождеству.

Уравнение (28. 12) играет роль своеобразного уравнения Шредингера для квазичастицы*. Для его решения можно применять известные методы квантовой механики. Функция $k^2(x)$, как и $\rho_0(x)$, слабо меняется в пространстве. Поэтому можно искать решение уравнения (28. 12) в квазиклассическом приближении. В частности, для s -волны и центральносимметричного $\rho_0(x)$

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp[i \int dx k(x)], \quad (28. 14)$$

* Однако функция Φ_n не является волновой функцией квазичастицы.

для нахождения спектра можно использовать равенство

$$\oint k(x) dx = 2\pi(n + 1/2).$$

28. 5. Рассмотрим задачу о коллективных колебаниях тяжелого атома [94], которая обсуждалась в литературе в связи с вопросами о потерях энергии быстрыми частицами и об учете плазменных колебаний ионного остатка в металлах [122].

Характерным отличием атома от протяженной среды является его ограниченность в пространстве и, как следствие, квантованность волнового числа k . Область атома, где выполнено условие сжатости, имеет радиус порядка $Z^{-1/3}a_0$. Именно в этой области первоначально возникает возбуждение. Наименьшее значение k оказывается порядка $Z^{1/3}/a_0$. Поэтому длинноволновой предельный случай в атоме, как и во всякой ограниченной системе, не осуществляется.

Это обстоятельство очень серьезно ограничивает возможность существования коллективных уровней [имеется в виду условие (28. 2)].

Мы не будем интересоваться величиной затухания квазичастицы и потому сможем ответить лишь на вопрос о том, какие коллективные уровни могли бы существовать с точки зрения условия (28. 2). Это условие оказывается весьма жестким, и могло бы случиться, что коллективных уровней нет вообще.

Трудность исследования несжатого атома состоит в том, что в нем условие $x_0 k_0 \gg 1$ не выполняется. Поэтому мы рассмотрим простую модель, заменяя истинное распределение плотности в атоме прямоугольным и подбирая радиус этого распределения r_0 из условия минимума энергии. Это дает

$$r_0 \approx 2,5a_0 Z^{-1/3} \text{ и } p_0 \approx \frac{0,8Z^{2/3}}{a_0}.$$

В уравнении (28. 12), которое в такой модели справедливо внутри атома, следует положить $k^2(x) = \text{const}$. Тогда его решение можно представить в виде

$$\Phi_n(x) \sim \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

где J и Y — бесселева и сферическая функции. Величину k можно найти из граничных условий. В наиболее интересном случае локализованной в атоме квазичастицы поток вещества через поверхность атома должен отсутствовать. Это условие, как показано в работе [94], можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r'} \right) \Phi_n(r, r') \Big|_{r=r'=r_0} = 0.$$

Совместное рассмотрение этого соотношения и дисперсионного уравнения, как функций k и ΔE_n , приводит к следующим результатам.

Во всех случаях, исключая $l = 1$, значение ΔE_n лежит выше $\Delta E_{кр}$, т. е. все соответствующие уровни являются по существу индивидуальными. Лишь для $l = 1$ получается одно допустимое решение *:

$$\Delta E_n = 1,41\omega_L \approx 20Z \text{ эв.}$$

Таким образом, если коллективные колебания атома и существуют, то вероятнее всего ожидать появления лишь одного уровня.

При наложении более жесткого граничного условия ($\Phi_n(r)|_{r=r_0} = 0$, твердая стенка) не существует ни одного решения, для которого ΔE_n было бы меньше $\Delta E_{кр}$.

Наличие коллективного уровня может радикально изменить картину атомных реакций в области энергий порядка сотен электронвольт, сближая ее с боровской картиной ядерных реакций. Резонансный электрон (рентгеновский квант) может передать свою энергию сразу многим электронам атома, переводя последний в сравнительно долгоживущее возбужденное состояние («компаунд-атом»). Распад этого состояния может идти по различным — упругим или неупругим — каналам. В частности, возможно выбрасывание «сгустка», состоящего из нескольких электронов.

Имеющиеся экспериментальные данные по многократной ионизации атомов благородных газов качественно соответствуют этой картине. Сечение ионизации имеет дополнительный, к тому же аномально высокий (для степеней ионизации $k = 2 \div 6$) максимум. С ростом Z сечение при постоянном k резко растет, что однозначно свидетельствует о коллективной природе процесса. Наконец, отношение соответствующих сечений для разных атомов быстро увеличивается с ростом k , что указывает на предпочтительное выбрасывание больших «сгустков» [123].

* Выделенный характер p -волны связан со специфичкой граничного условия.

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ

§ 29. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

29. 1. В этой главе рассмотрим некоторые вопросы квантовой теории системы многих частиц, заключенной в термостат с отличной от нуля температурой T и находящейся в статистическом равновесии. Такая постановка задачи предполагает, что рассматриваемая система состоит из достаточно большого числа частиц. При этом условии допустимо считать, что полное число частиц системы не строго фиксировано, а может испытывать термодинамические флуктуации, связанные с обменом частицами между системой и ее окружением. Такой подход, приводящий к фиксации числа частиц лишь в среднем, весьма удобен для описания статистических свойств системы, состоящей из большого числа частиц [4].

В рамках этого подхода основное утверждение квантовой статистики состоит в следующем. Равновесная система многих частиц, обладающая температурой T , находится не в чистом состоянии, характеризующемся определенной волновой функцией, а в смешанном состоянии, весовые множители которого даются формулой Гиббса и зависят от температуры. Точнее говоря, состояние системы в термостате описывается матрицей плотности

$$\sum_n P_n \Psi_n^*(Q') \Psi_n(Q),$$

где суммирование ведется по всему полному набору стационарных состояний Ψ_n , а весовые множители определяются соотношением

$$P_n = \exp [\beta (\Omega + \mu N_n - E_n)]. \quad (29. 1)$$

Здесь $\beta \equiv 1/kT$ (k — постоянная Больцмана), Ω — термодинамический потенциал системы, μ — ее химический потенциал, E_n — энергия состояния с числом частиц N_n .

При стремлении температуры к нулю ($\beta \rightarrow \infty$) из всей суммы по n остается лишь один член, отвечающий наименьшему значению E_n ; при этом мы возвращаемся к рассмотренному в предыдущих главах основному состоянию системы*.

* Сказанное справедливо лишь при условии, что это состояние невырождено. В противном случае получается сумма (с равными весами) выражений, каждое

С помощью введенных выше величин можно записать среднее значение любой величины, относящейся к рассматриваемой системе и характеризующейся некоторым оператором α

$$\langle \alpha \rangle = \sum_n P_n \int dQ \Psi_n^*(Q) \alpha \Psi_n(Q).$$

Усреднение здесь понимается в двояком (квантовомеханическом и статистическом) смысле. Если ввести операторы Гамильтона H и полного числа частиц N , для которых имеют место очевидные соотношения

$$(H - E_n) \Psi_n = 0, \quad (N - N_n) \Psi_n = 0,$$

то выражение для $\langle \alpha \rangle$ можно переписать в более удобной форме

$$\langle \alpha \rangle = \text{Sp} \{ \exp [\beta (\Omega - \mu N - H)] \alpha \}, \quad (29.2)$$

отличающейся своей инвариантностью относительно выбора представления. (О свойствах шпура и способах его вычисления см. приложение А.)

Термодинамический потенциал Ω может быть найден из условия нормировки, для получения которого достаточно подставить в выражение (29.2) единицу вместо оператора α . Это даст

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Sp} \exp [\beta (\mu N - H)]. \quad (29.3)$$

Удобно ввести оператор

$$\xi = \exp [\beta (\mu N - H)], \quad (29.4)$$

носящий название статистического оператора, и величину

$$Z = \text{Sp} (\xi), \quad (29.5)$$

называемую статистической суммой. Тогда соотношения (29.2) и (29.3) перепишутся в виде

$$\langle \alpha \rangle = \frac{\text{Sp} (\xi \alpha)}{\text{Sp} (\xi)}, \quad (29.6)$$

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (29.7)$$

Последнее соотношение позволяет определить все термодинамические характеристики системы *

$$\left. \begin{aligned} P &= -\Omega/V, \quad S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_\mu, \\ N &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T, V}, \quad E = \Omega + \mu N + TS, \end{aligned} \right\} \quad (29.8)$$

из которых относится к одному из подсостояний. По этой причине нельзя считать, что квантовая статистика включает в себя квантовую механику как предельный случай.

* Соотношение (29.7) дает Ω как функцию объема V , температуры T и химического потенциала μ . Последний выражается через среднее число частиц N , T и V с помощью третьего соотношения (29.8). В этой главе объем обозначается через V .

где P, S, N, E — средние значения давления, энтропии, числа частиц и энергии системы соответственно [4].

29. 2. Помимо общих термодинамических характеристик системы значительный интерес представляют также и более детальные ее характеристики: всевозможные распределения средних значений, спектр и затухание квазичастиц и т. д. Как и в случае равной нулю температуры, соответствующая информация содержится в функциях Грина. В последующих разделах этого параграфа мы подробно рассмотрим свойства функций Грина в квантовой статистике.

В ряде случаев для вычисления распределений динамических переменных, т. е. вероятностей обнаружения определенных их значений, оказывается удобным использовать следующий прямой путь.

Пусть нас интересует вероятность обнаружения значения α величины, описываемой оператором α . Эта вероятность дается выражением

$$W(\alpha) = \frac{\text{Sp} \{ \xi \delta(\alpha - \alpha) \}}{\text{Sp}(\xi)}. \quad (29. 9)$$

Чтобы убедиться в его правильности, возьмем шпур по системе функций, являющихся собственными функциями оператора α . Тогда

$$W(\alpha) = \frac{\sum_n \langle n | \xi | n \rangle \delta(\alpha - \alpha_n)}{\sum_n \langle n | \xi | n \rangle}. \quad (29. 10)$$

Среднее значение какой-либо функции f при этом определится с одной стороны формулой

$$\langle f(\alpha) \rangle = \int da f(\alpha) W(\alpha),$$

с другой стороны формулой

$$\langle f(\alpha) \rangle = \frac{\text{Sp} \{ \xi f(\alpha) \}}{\text{Sp}(\xi)} = \frac{\sum_n \langle n | \xi | n \rangle f(\alpha_n)}{\sum_n \langle n | \xi | n \rangle}.$$

Совпадение обоих выражений при использовании равенства (29. 10) подтверждает правильность выражения (29. 9). Нетрудно также убедиться, что распределение (29. 9) имеет нужную нормировку.

Вместо выражения (29. 9) удобно рассматривать фурье-образ функции $W(\alpha)$, который мы обозначим через $A(q)$:

$$\begin{aligned} A(q) &= \int da \exp(-iq\alpha) W(\alpha) = \\ &= \frac{\text{Sp} \{ \xi \exp(-iq\alpha) \}}{\text{Sp}(\xi)}. \end{aligned} \quad (29. 11)$$

Если теперь вычислить производную

$$\frac{\partial \ln A(q)}{\partial q} = -i \frac{\text{Sp} [\xi \exp(-iq\alpha) \alpha]}{\text{Sp} [\xi \exp(-iq\alpha)]},$$

то видно, что она с точностью до множителя совпадает со средним значением оператора α по состояниям фиктивной системы, статистическим оператором которой является величина $\xi \exp(-iq\alpha)$. Такого рода средние обозначим символом $\langle \dots \rangle_{\alpha}$. Учитывая условие $A(0) = 1$, находим [124]

$$A(q) = \exp \left\{ -i \int_0^q dq \langle \alpha \rangle_{\alpha} \right\}. \quad (29.12)$$

В качестве примера рассмотрим распределение числа частиц системы. При этом выяснятся условия возможности пренебрежения флуктуацией числа частиц. Полагая $\alpha = N$ и учитывая коммутацию операторов N и H , можно написать

$$\xi \exp(-iq\alpha) = \exp \left\{ \beta \left[\left(\mu - \frac{iq}{\beta} \right) N - H \right] \right\}.$$

Таким образом, соотношение (29.3) дает

$$W(N) = \frac{1}{2\pi} \int dq \exp \left\{ iqN - \beta \left[\Omega \left(\mu - \frac{iq}{\beta} \right) - \Omega(\mu) \right] \right\}. \quad (29.13)$$

Все сводится к вычислению термодинамического потенциала при комплексных значениях аргумента, или, что то же, к аналитическому продолжению Ω в комплексную плоскость μ [124].

Учитывая малость $\frac{q}{\beta} \sim \frac{1}{N\beta}$ по сравнению с μ и разлагая выражение в квадратных скобках из соотношения (29.13) в ряд по $\frac{iq}{\beta}$, получим

$$\Omega \left(\mu - \frac{iq}{\beta} \right) - \Omega(\mu) = \frac{iq}{\beta} \langle N \rangle + \frac{q^2}{2\beta^2} \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} + \dots$$

Подставляя это разложение в (29.13), получим гауссово распределение

$$W(N) = (2\pi (\overline{\Delta N})^2)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{(N - \langle N \rangle)^2}{2(\overline{\Delta N})^2} \right\}, \quad (29.14)$$

где

$$(\overline{\Delta N})^2 = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu}$$

среднеквадратичная флуктуация числа частиц в системе. Эта величина пропорциональна полному числу частиц, откуда следует, что с увеличением последнего относительная флуктуация N падает.

Аналогичным образом можно рассмотреть и флуктуацию полной энергии системы. Для этого используем соотношение (29. 12), учитывая, что

$$\xi \exp(-iqH) = \exp\left\{\beta \left[\mu N - \left(1 + \frac{iq}{\beta}\right) H\right]\right\}.$$

Отсюда

$$\langle H \rangle_E = E \left(\beta \rightarrow \beta + iq, \mu \rightarrow \mu \frac{\beta}{\beta + iq} \right).$$

При малых q

$$\langle H \rangle_E = \langle E \rangle - iq \left(- \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} + \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \mu} \right).$$

Таким образом,

$$W(E) = [2\pi (\overline{\Delta E})^2]^{-1/2} \exp \left[- \frac{(E - \langle E \rangle)^2}{2(\overline{\Delta E})^2} \right], \quad (29. 15)$$

где

$$(\overline{\Delta E})^2 = \frac{\mu}{\beta} \cdot \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \mu} - \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta}.$$

В этом и предыдущем расчетах дифференцирование совершается при постоянных значениях остальных аргументов.

29. 3. Рассмотрим одночастичную функцию Грина в квантовой статистике.

Эта величина по-прежнему определяется как среднее значение хронологически упорядоченного произведения операторов, однако усреднение теперь следует производить не по основному состоянию системы, а по статистическому ансамблю:

$$G(1, 2) = -i \frac{\text{Sp} \{ \xi [T(\psi_r(1) \psi_r^\dagger(2))] \}}{\text{Sp}(\xi)}. \quad (29. 16)$$

Операторы поля берутся в гейзенберговском представлении.

Как и в случае нулевой температуры, для функции Грина можно получить спектральное представление [125]. С этой целью перепишем соотношение (29. 16) в виде

$$G(1, 2) = -i \sum_n \exp[\beta(\Omega - \mu N_n - E_n)] \times \\ \times \langle \Psi_n | T[\psi_r(1) \psi_r^\dagger(2)] | \Psi_n \rangle$$

и введем полную промежуточную систему функций Ψ_m . При этом нам придется иметь дело с матричными элементами операторов поля типа $\langle \Psi_n | \psi_r | \Psi_m \rangle$, $\langle \Psi_m | \psi_r^\dagger | \Psi_n \rangle$. Явно выделяя зависимость от времени и учитывая свойства операторов ψ_r и ψ_r^\dagger , можно написать

$$\langle \Psi_n | \psi_r(1) | \Psi_m \rangle = \langle \Psi_n | \psi(q_1) | \Psi_m \rangle \exp[-i(E_m - E_n)t_1], \\ \langle \Psi_m | \psi_r^\dagger(1) | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_m | \psi^\dagger(q_1) | \Psi_n \rangle \exp[i(E_m - E_n)t_1],$$

причем числа частиц в состояниях Ψ_m и Ψ_n , для которых получается отличное от нуля значение матричного элемента, связаны соотношением $N_m = N_n + 1$.

При $t_1 > t_2$

$$G(1, 2) = -i \sum_{n, m} \exp [\beta (\Omega + \mu N_n - E_n)] \exp [-i (E_m - E_n) (t_1 - t_2)] \times \\ \times \langle \Psi_n | \Psi(q_1) | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \Psi^+(q_2) | \Psi_n \rangle ;$$

при $t_1 < t_2$

$$G(1, 2) = i \sum_{n, m} \exp [\beta (\Omega + \mu N_n - E_n)] \exp [i (E_m - E_n) (t_1 - t_2)] \times \\ \times \langle \Psi_m | \Psi(q_1) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi^+(q_2) | \Psi_m \rangle .$$

В последнем соотношении удобно заменить индексы $n \leftrightarrow m$. С учетом связи между N_m и N_n это дает

$$G(1, 2) = i \sum_{n, m} \exp [\beta (\Omega + \mu N_n - E_n)] \exp [-i (E_m - E_n) (t_1 - t_2)] \times \\ \times \langle \Psi_m | \Psi(q_1) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi^+(q_2) | \Psi_m \rangle \times \\ \times \begin{cases} 1 & t_1 > t_2 \\ -\exp [\beta (E_n - E_m + \mu)] & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (29.17)$$

Переходя к фурье-образу по $t_1 - t_2$ и заменяя суммирование по n, m интеграцией по разности $E_m - E_n = E$ и суммированием по остальным переменным, приходим к окончательной спектральной формуле:

$$G(q_1, q_2, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dEA(q_1, q_2, E) \times \\ \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon - E + i\delta} + \frac{\exp [-\beta (E - \mu)]}{\varepsilon - E - i\delta} \right\}. \quad (29.18)$$

В случае пространственно-однородной системы имеем просто

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dEa(\vec{p}, E) \times \\ \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon - E + i\delta} + \frac{\exp [-\beta (E - \mu)]}{\varepsilon - E - i\delta} \right\}, \quad (29.19)$$

где $a(\vec{p}, E) \geq 0$.

Выделим из $a(\vec{p}, E)$ множитель $\{1 + \exp [\beta (\mu - E)]\}^{-1}$ и примем во внимание тождество

$$\frac{e^x}{(1 + e^x)} = \frac{1}{(1 + e^{-x})}.$$

Тогда выражение (29. 19) можно переписать в следующем виде:

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dE a'(\vec{p}, E) \times \\ \left\{ \frac{1}{(\varepsilon - E - i\delta) \{1 + \exp[-\beta(E - \mu)]\}} - \frac{1}{(\varepsilon - E - i\delta) \{1 + \exp[\beta(E - \mu)]\}} \right\}. \quad (29. 20)$$

Из этого соотношения очень наглядно видно, как происходит предельный переход при $\beta \rightarrow \infty$ к случаю нулевой температуры.

Далее, соотношение (29. 20) позволяет дать простую физическую интерпретацию функции Грина как функции совместного распространения свободных частиц и дырок с различными энергиями E . В отличие от случая $T = 0$ здесь соответствующие функции распространения имеют дополнительные факторы

$$n = \{1 - \exp[\beta(E - \mu)]\}^{-1}, \quad 1 - n = \{1 + \exp[-\beta(E - \mu)]\}^{-1},$$

которые представляют собой известные средние числа заполнения частиц и дырок в распределении Ферми. Отличие этих чисел от нуля и единицы является характерным свойством случая отличной от нуля температуры. Таким образом, веса, с которыми представлены в функции Грина частицы и дырки, определяются не только динамикой системы (фактор $a'(\vec{p}, E)$), но и числами заполнения свободных частиц и дырок с той же энергией E .

29. 4. Разберем некоторые следствия спектральной формулы. Прежде всего, установим соотношение между действительной и мнимой частями функции Грина при действительных значениях энергии ε .

Из соотношения (29. 19) нетрудно найти, что

$$\operatorname{Re} G(\vec{p}, \varepsilon) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE a(\vec{p}, E)}{\varepsilon - E} \{1 - \exp[-\beta(E - \mu)]\}, \\ \operatorname{Im} G(\vec{p}, \varepsilon) = -\pi a(\vec{p}, \varepsilon) \{1 - \exp[-\beta(\varepsilon - \mu)]\}.$$

Последнее соотношение показывает, что знак $\operatorname{Im} G(\vec{p}, \varepsilon)$ противоположен знаку $\varepsilon - \mu$ и что обе эти величины одновременно проходят через нуль. Используя далее простую формулу

$$\operatorname{cth} \frac{x}{2} = \frac{\exp(x) + 1}{\exp(x) - 1},$$

приходим к искомому соотношению [125]

$$\operatorname{Re} G(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{\varepsilon - E} \operatorname{cth} \left[\frac{\beta(E - \mu)}{2} \right] \operatorname{Im} G(\vec{p}, E), \quad (29. 21)$$

которое позволяет определить правила обхода особенностей в функции Грина. Для этой цели оно применялось в теории сверхпроводимости [108].

При $T \neq 0$ функция Грина в комплексной области уже не обладает теми аналитическими свойствами, которые присущи функции Грина в квантовой механике (см. § 23). Это связано с невозможностью представления функции Грина в виде интеграла типа Коши. Для иллюстрации представим $G = \text{Re } G + i \text{Im } G$ с помощью соотношения (29. 21) в следующем виде:

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Im } G(\vec{p}, E) \times \\ \times \left\{ -\text{cth} \frac{\beta(E - \mu)}{2} \cdot \frac{1}{\varepsilon - E} + i\pi\delta(\varepsilon - E) \right\}.$$

При $T \neq 0$ ($\beta \neq \infty$) слагаемые фигурной скобки нельзя объединить в виде характерного ядра интеграла Коши. Такое объединение возможно для функции

$$G'(\vec{p}, \varepsilon) = \text{Re } G(\vec{p}, \varepsilon) - i \text{cth} \frac{\beta(\varepsilon - \mu)}{2} \text{Im } G(\vec{p}, \varepsilon),$$

которая обладает теми же аналитическими свойствами, что и функция Грина в квантовой механике. Иными словами, ее аналитическое продолжение в верхнюю (при $\varepsilon > \mu$) и нижнюю (при $\varepsilon < \mu$) полуплоскости комплексной переменной ε приводит к аналитическим функциям, не имеющим особенностей. Однако аналитическое продолжение $G'(\vec{p}, \varepsilon)$ в нижнюю (при $\varepsilon > \mu$) и верхнюю (при $\varepsilon < \mu$) полуплоскости неизбежно приводит к функциям с особенностями. С точки зрения местоположения этих особенностей и вычетов в них, безразлично, продолжать ли функцию G' или $\text{Im } G' = -\text{cth} \frac{\beta(\varepsilon - \mu)}{2} \text{Im } G$. Особенности множителя $\text{cth} \frac{\beta(\varepsilon - \mu)}{2}$, который приводит к отличию функций $\text{Im } G$ и $\text{Im } G'$, находятся в точках $\varepsilon = \mu + 2\pi ni$, где n — целое число. К проблеме отыскания характеристик квазичастиц эти особенности не имеют отношения, отвечая «нулевой» энергии квазичастицы. Поэтому разница между функциями G и G' по существу отсутствует.

Развитые в § 23 соображения о физическом смысле особенностей аналитического продолжения функции G могут быть полностью повторены в применении к функции G' . Местоположение полюса аналитического продолжения G' (или G) определяет закон дисперсии и затухания квазичастицы (или элементарного возбуждения) при отличной от нуля температуре. Соответствующая физическая информация о системе по существу та же, что и в случае нулевой температуры. Необходимо только подчеркнуть, что

найденные описанным образом характеристики квазичастицы будут неизбежно зависеть от температуры, поскольку такая зависимость свойственна весовой функции $a(\vec{p}, E)$. Поэтому чисто механическая интерпретация квазичастиц, связанная с рассмотрением энергетического спектра полного гамильтониана системы, оказывается невозможной. Речь должна идти о некотором эффективном, статистическом усредненном спектре возбуждений, описывающем слабо затухающие (при малой величине декремента затухания) движения в системе.

В квантовой статистике часто используют также так называемые «опережающие» и «запаздывающие» функции Грина [6, 126, 127], к числу которых относятся, например, величины

$$G_a(1, 2) = i\theta(t_2 - t_1) \frac{\text{Sp} [\xi \{ \Psi_r(1), \Psi_r^\dagger(2) \}]}{\text{Sp} (\xi)},$$

$$G_r(1, 2) = -i\theta(t_1 - t_2) \frac{\text{Sp} [\xi \{ \Psi_r(1), \Psi_r^\dagger(2) \}]}{\text{Sp} (\xi)}.$$

Эти функции в отличие от G имеют те же аналитические свойства, что и функция Грина в квантовой механике, и тесно связаны с функцией G' .

§ 30. ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ — ФОКА В КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ

30. 1. Практическое использование приведенных в предыдущем параграфе общих соотношений предполагает решение динамической задачи с учетом взаимодействия между частицами. Эта задача (исключая случай очень высоких температур) не легче, чем в квантовой механике. Поэтому, как и в случае равной нулю температуры, следует начать с выбора нулевого приближения, в качестве которого удобно взять приближение Хартри—Фока.

Переход к этому приближению осуществляется путем отыскания наилучшего из одночастичных приближений, т. е. требуется, чтобы норма разности точного и одночастичного гамильтонианов, усредненная по интересующему нас состоянию системы, имела минимальную величину. В квантовой статистике фигурирует не одно, а фактически все состояния системы. Поэтому встает вопрос о смысле, который следует вложить в понятие «наилучшее приближение».

В принципе можно было бы требовать наилучшего описания каждого из состояний, фигурирующих в статистических формулах (см. раздел 29. 1.). Каждому из этих состояний тогда соответствовало бы свое самосогласованное поле. Однако такой подход привел бы к нарушению мультипликативности матриц плотности высшего порядка (см. приложение А) и оказался бы в противоречии с предъявляемым к нулевому приближению неизменным требованием математической простоты.

Поэтому под приближением Хартри—Фока в квантовой статистике обычно понимают более грубое приближение, сводящееся к введению единого для всех конфигураций Ψ_n статистически усредненного самосопряженного поля. Такому подходу отвечает требование минимума статистического среднего от нормы разности точного гамильтониана H и одночастичного H_0 :

$$\langle (H - H_0)^2 \rangle_0 = \min, \quad (30.1)$$

где символ $\langle \dots \rangle_0$ означает усреднение в одночастичном приближении

$$\left. \begin{aligned} \langle \dots \rangle_0 &= \frac{\text{Sp} [\xi_0 (\dots)]}{\text{Sp} (\xi_0)}, \\ \xi_0 &= \exp [\beta (\mu N - H_0)]. \end{aligned} \right\} \quad (30.2)$$

Как и в гл. II, выберем H_0 в виде

$$H_0 = \int dq \Psi^\dagger(q) (T \pm W) \Psi(q) - C.$$

Тогда оператор ξ_0 можно записать в форме

$$\xi_0 = \exp \left\{ -\beta C \pm \beta \sum_{\nu} (\mu - \varepsilon_{\nu}) A_{\nu}^{\dagger} A_{\nu} \right\},$$

где ε_{ν} — энергия одночастичного состояния

$$(T \pm W) \chi_{\nu}(q) = \varepsilon_{\nu} \chi_{\nu}(q).$$

Здесь мы пока не переходим к дырочному описанию.

Выведем правила усреднения с помощью оператора ξ_0 . Имеем

$$\begin{aligned} \langle A_{\mu}^{\dagger} A_{\nu} \rangle_0 &= \delta_{\mu\nu} \langle A_{\nu}^{\dagger} A_{\nu} \rangle_0 = \\ &= -\frac{\delta_{\mu\nu}}{\beta} \cdot \frac{\left[\frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\nu}} \text{Sp} (\xi'_0) \right]}{\text{Sp} (\xi'_0)}, \end{aligned}$$

где

$$\xi'_0 \equiv \xi_0 \exp (\beta C).$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \langle A_{\mu}^{\dagger} A_{\nu}^{\dagger} A_{\sigma} A_{\tau} \rangle_0 &= \\ &= (\delta_{\nu\sigma} \delta_{\mu\tau} - \delta_{\nu\tau} \delta_{\mu\sigma}) \frac{1}{\beta^2} \cdot \frac{\left[\frac{\partial^2}{\partial \varepsilon_{\mu} \partial \varepsilon_{\nu}} \text{Sp} (\xi'_0) \right]}{\text{Sp} (\xi'_0)} \end{aligned}$$

и т. д. Все сводится к вычислению статистической суммы $Z_0 = \text{Sp} (\xi_0)$. Записывая ее в виде

$$Z_0 = \sum_n \exp [\beta (\mu N_n - E_n)]$$

и полагая $N_n = \sum_{\nu} n_{\nu}$, $E_n = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} n_{\nu} + C$, где n_{ν} — число заполнения уровня ν , имеем

$$\begin{aligned} Z_0 &= \exp(-\beta C) \sum_n \prod_{\nu} \{\exp[\beta(\mu - \epsilon_{\nu})]\}^{n_{\nu}} = \\ &= \exp(-\beta C) \prod_{\nu} \{1 + \exp[\beta(\mu - \epsilon_{\nu})]\}. \end{aligned} \quad (30. 3)$$

Здесь мы использовали то обстоятельство, что, изменяя произвольным образом на каждом уровне число заполнения n_{ν} , т. е. полагая последнее равным 0 и 1, можно перебрать все состояния n .

Таким образом, мы приходим к выражениям

$$\begin{aligned} \langle A_{\mu}^+ A_{\nu} \rangle_0 &= \delta_{\mu\nu} \bar{n}_{\nu}, \\ \langle A_{\mu}^+ A_{\nu}^+ A_{\sigma} A_{\tau} \rangle_0 &= (\delta_{\nu\sigma} \delta_{\mu\tau} - \delta_{\nu\tau} \delta_{\mu\sigma}) \bar{n}_{\mu} \bar{n}_{\nu} \end{aligned}$$

и т. д., где введено среднее число заполнения состояния

$$\bar{n}_{\nu} = \{1 + \exp[\beta(\epsilon_{\nu} - \mu)]\}^{-1}. \quad (30. 4)$$

Сравнивая полученные выражения с результатами приложения А и § 4, мы видим, что если в статистике ввести оператор заполнения \mathfrak{q}

$$\mathfrak{q} \chi_{\nu}(q) = \bar{n}_{\nu} \chi_{\nu}(q),$$

где в явном виде

$$\mathfrak{q} = \{1 + \exp[\beta(T + W - \mu)]\}^{-1}, \quad (30. 5)$$

то все правила усреднения, сформулированные в квантовой механике, остаются в силе (фактор $\exp(\beta C)$ при усреднении сокращается). В частности, для одночастичного и двухчастичного операторов имеем

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{a}_1 \rangle_0 &= \text{Sp}(\mathbf{a}_1 \mathfrak{q}), \\ \langle \mathbf{a}_2 \rangle_0 &= \frac{1}{2} \text{Sp}[\mathbf{a}_2 (1 - \mathcal{F}_{12}) \mathfrak{q}_1 \mathfrak{q}_2]. \end{aligned}$$

Варьирование выражения (30. 1) по H_0 приводит к соотношениям

$$W = \text{Sp}_{q'} [V(q, q') (1 - \mathcal{F}_{qq'}) \mathfrak{q}_{q'}], \quad (30. 6)$$

$$C = -\frac{1}{2} \text{Sp} [V(q, q') (1 - \mathcal{F}_{qq'}) \mathfrak{q}_q \mathfrak{q}_{q'}], \quad (30. 7)$$

которыми гамильтониан приближения Хартри — Фока определяется полностью. Матричные элементы оператора \mathfrak{q} по-прежнему дают матрицу плотности системы (в приближении Хартри — Фока)

$$R_0(q, q') = \sum_{\nu} \bar{n}_{\nu} \chi_{\nu}^*(q') \chi_{\nu}(q). \quad (30. 8)$$

Обычным способом можно перейти к функции распределения $f(\vec{x}, \vec{p})$ (см. § 4). Соотношения (4. 29)—(4. 34) гл. II также

полностью сохраняют свою силу, если произвести в них соответствующую замену оператора заполнения.

Не составляет труда записать выражение для функции Грина в приближении Хартри—Фока. Надо просто заменить в соотношениях § 10 величину n_ν на $\{\exp [\beta (\epsilon_\nu - \mu)] + 1\}^{-1}$. В частности, для однородной системы

$$G_0(\vec{p}, \epsilon) = \frac{1 - n_{\vec{p}}}{\epsilon - \epsilon_{\vec{p}} + i\delta} + \frac{n_{\vec{p}}}{\epsilon - \epsilon_{\vec{p}} - i\delta}. \quad (30.9)$$

Здесь $n_{\vec{p}}$ — среднее число заполнения уровня, равное

$$\{\exp [\beta (\epsilon_{\vec{p}} - \mu)] + 1\}^{-1};$$

химический потенциал μ находится из условия нормировки

$$g \int d^3p n_{\vec{p}} = \rho.$$

Нетрудно видеть, что соотношение (30.9) находится в полном соответствии с общей спектральной формулой (29.21) и отвечает выбору

$$\text{Im } G(\vec{p}, \epsilon) = \pi (2n_{\vec{p}} - 1) \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{p}}).$$

Возвратимся к выражению для среднего числа заполнения. Эта величина зависит только от энергии, и все подсостояния, отвечающие данному значению энергии, заполнены в одинаковой степени. Это обстоятельство сближает статистическую систему с системой при абсолютном нуле, обладающей заполненными оболочками. Благодаря этому при последующем построении теории возмущений не возникает усложнений, связанных с вырождением уровней нулевого приближения.

30.2. Особого внимания требует вопрос о вычислении энергии и других термодинамических величин в приближении Хартри—Фока. Средняя энергия системы может быть определена, во-первых, как среднее значение гамильтониана H_0 (динамическое определение энергии)

$$E_0 = \langle H_0 \rangle_0$$

и, во-вторых, чисто термодинамически

$$E_0 = \left(1 + \beta \frac{\partial}{\partial \beta} - \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \right) \Omega_0.$$

В приближении Хартри—Фока эти определения не совпадают. Связано это с тем, что эффективный гамильтониан приближения H_0 в отличие от точного гамильтониана H сам зависит от β и μ .

Рассмотрим термодинамическое определение энергии, подставляя вместо Ω_0 величину $-\frac{1}{\beta} \ln \text{Sp} \{ \exp [\beta (\mu N - H_0)] \}$. Несложный расчет дает

$$E_0 = \left\langle \exp (\beta H_0) \left(\frac{\mu}{\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \exp (-\beta H_0) \right\rangle_0.$$

Если бы гамильтониан H_0 не зависел от β и μ , то мы вернулись бы к динамическому определению. Однако в рассматриваемом случае необходимо дополнительно дифференцировать H_0 по β и μ .

Расхождение в двух определениях энергии объясняется упрощенным проведением процедуры самосогласования. Если бы эта процедура проводилась для каждой из конфигураций Ψ_n , то эффективный гамильтониан H_0 (разный для разных конфигураций) не содержал бы никакой зависимости от β и μ .

По тем же причинам в приближении Хартри — Фока теряет свою силу целый ряд термодинамических соотношений, в частности, дифференциальные соотношения (29. 8). Рассмотрим, например, производную

$$\left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} \right)_T = -N - \frac{1}{\beta} \left\langle \exp (\beta H_0) \frac{\partial}{\partial \mu} \exp (-\beta H_0) \right\rangle_0.$$

Зависимость H_0 от μ приводит к отличной от нуля величине второго члена правой части этого равенства *. Поэтому в рассматриваемом приближении термодинамические определения физических величин, основанные на соотношениях типа (29. 8), использовать нельзя. Следует либо опираться на динамические определения, в частности

$$E_0 = \langle H_0 \rangle_0 \text{ и } N = \langle N \rangle_0,$$

либо использовать термодинамические соотношения, формально полагая при этом величины W и C не зависящими от μ и β . Последнее означает, что необходимые дифференцирования по μ и β следует проводить до процедуры самосогласования, приводящей к появлению зависимости W и C от μ и β .

Рассмотрим с этой точки зрения давление P . Эту величину можно определить чисто динамическим образом, как действующую на систему силу, отнесенную к единице поверхности; такой подход был принят, в частности, в работе [63]. Другая возможность состоит в использовании чисто термодинамического соотношения

$$P = - \frac{\Omega_0}{V},$$

для вывода которого необходимо считать величины W и C не зависящими от μ и β .

* По этой же причине в квантовой механике нарушается ряд общих соотношений типа $\partial P / \partial \mu = \rho$.

Прямое вычисление термодинамического потенциала Ω_0 приводит к соотношению *

$$\Omega_0 = - \int_{-\infty}^{\mu} d\mu \operatorname{Sp}(\varrho) + C, \quad (30.10)$$

для получения которого достаточно учесть равенство

$$\ln \{1 + \exp [\beta (\mu - \varepsilon_v)]\} = \beta \int_{-\infty}^{\mu} d\mu n_v.$$

Величину $C = -\frac{1}{2} \operatorname{Sp}(\mathcal{W}\varrho)$ можно, как и в § 4, представить в более простом виде, исключив из нее обменный оператор A [43].

30.3. Аппарат теории слабонеоднородных систем можно упростить путем перехода к квазиклассическому приближению. Как и в случае нулевой температуры, все сводится к пренебрежению коммутаторами слагаемых гамильтониана частицы $T + W$.

Проанализируем вопрос о пределах применимости квазиклассического приближения. В целом можно сказать, что отличие температуры от нуля приводит к лучшей применимости квазиклассики. Дело в том, что в «нагретой» среде кинетическая энергия и средний импульс частиц выше (при прочих равных условиях), нежели в холодной. Соответственно меньшую величину имеет длина волны де Бройля частицы.

Соответствующий параметр ξ^2 (см. § 5) имеет разные выражения в области вырожденного газа ($\beta q^{2/3}/M \gg 1$) и в области высоких температур ($\beta q^{2/3}/M \ll 1$), где осуществляется статистика Больцмана. В первом случае справедливы приведенные в § 5 оценки

$$\xi^2 \sim q^{-1/3}, \quad (30.11)$$

во втором [63] —

$$\xi^2 \sim \beta q^2. \quad (30.12)$$

Поэтому зависимость квантового параметра ξ^2 от плотности в противоположность зависимости от температуры немонотонна: при малой плотности, отвечающей больцмановскому случаю, ξ^2 растет с увеличением плотности, достигая максимума на границе вырождения, а затем падает. Примерный вид линий постоянной величины ξ в координатах (T, ρ) показан на рис. 66.

Относительная роль обменных эффектов для систем с кулоновским взаимодействием определяется параметром

$$2MA_i p_0^2 \sim e^2 q / p_0^2, \quad (30.13)$$

где по-прежнему **

$$p_0^2 = 2M(\mu - B - U). \quad (30.14)$$

* Интегрирование производится при фиксированных W и C .

** В данном случае p_0^2 не может интерпретироваться как квадрат граничного импульса, а играет роль просто некоторой характерной величины соответствующей размерности.

Указанный параметр во всей области изменения ρ и T совпадает по порядку величины с ξ^2 . Поэтому и в случае отличной от нуля температуры применение метода Томаса — Ферми — Дирака не может быть оправдано: квантовые и обменные эффекты следует рассматривать на равных началах.

В пренебрежении обменными эффектами уравнение Хартри можно записать в следующей операторной форме ($\lambda = \beta/2M$):

$$\left. \begin{aligned} f(\vec{x}, \vec{p}) &= \left\langle \left\{ \exp \left[\lambda \left(p^2 - p_0^2(\vec{x}) \right) \right] + 1 \right\}^{-1} \right\rangle_{\vec{p}} \\ \varrho(\vec{x}) &= g \int d^3p f(\vec{x}, \vec{p}) \end{aligned} \right\} \quad (30.15)$$

и

$$\Delta p_0^2 = \frac{8\pi}{a_0} [\varrho(x) - \sigma(x)].$$

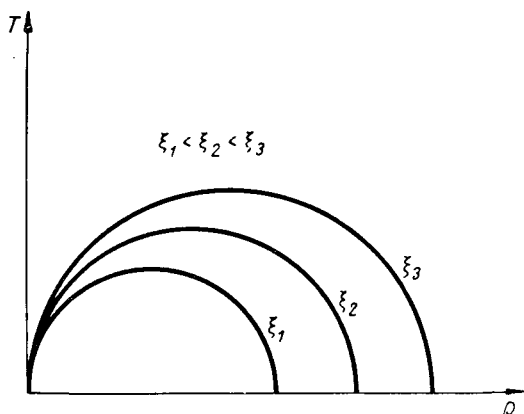


Рис. 66

Если параметр ξ^2 достаточно мал, то, пренебрегая некоммутативностью операторов p^2 и $p_0^2(x)$, находим следующее выражение для функции распределения:

$$f(\vec{x}, \vec{p}) = \left\{ \exp \left[\lambda \left(p^2 - p_0^2(x) \right) \right] + 1 \right\}^{-1}. \quad (30.16)$$

Плотность, как функция p_0^2 , принимает вид

$$\varrho = \left(2\pi^2 \lambda^{3/2} \right)^{-1} I_{1/2}(\lambda p_0^2). \quad (30.17)$$

Здесь и ниже вводятся функции Ферми—Дирака [128]

$$I_n(x) = \int_0^\infty \frac{y^n dy}{\exp(y-x) + 1}, \quad (30.18)$$

удовлетворяющие соотношению

$$I'_n = n I_{n-1} \quad (30.19)$$

и имеющие асимптотику при $x \rightarrow \infty$

$$I_n(x) = \frac{x^{n+1}}{n+1} + \frac{\pi^2}{6} nx^{n-1} + \dots \quad (30.20)$$

и при $x \rightarrow -\infty$

$$I_n(x) = \Gamma(n+1)e^x. \quad (30.21)$$

Остановимся на вопросе о том, как происходит предельный переход в выражении (30.17) при $\beta \rightarrow \infty$ и $\beta \rightarrow 0$. В первом случае $\mu \rightarrow \varepsilon_F$, $\lambda p_0^2 \rightarrow \infty$, и мы немедленно с помощью соотношения (30.20) возвращаемся к обычному выражению для ϱ . Сложнее обстоит дело при $\beta \rightarrow 0$. В этом случае химический потенциал μ оказывается сильно меняющейся функцией β . Предположим, что при $\beta \rightarrow 0$ величина $\lambda p_0^2 \sim \lambda \mu \rightarrow -\infty$. Тогда соотношение (30.17) принимает вид

$$\varrho \sim \lambda^{-3/2} e^{\lambda \mu},$$

откуда видно, что при $\lambda \rightarrow 0$ действительно $\lambda \mu \rightarrow -\infty$ и, следовательно, $\mu \rightarrow -\infty$. Поэтому в пределе высокой температуры следует пользоваться асимптотикой (30.21), приводящей к формуле Больцмана для распределения плотности.

30.4. Рассмотрим уравнение состояния сильно сжатого «горячего» вещества, ограничиваясь областью, где распределение электронов можно считать практически однородным (общий случай рассмотрен в работе [63], которой мы здесь следуем). Распределение может считаться однородным либо в случае высоких сжатий, либо при высокой температуре. Качественно граница области однородности совпадает с кривыми рис. 6б. В области однородности вклад взаимодействия в уравнение состояния невелик. Из результатов раздела 30.2 следует, что в пренебрежении членом C

$$P = \int_{-\infty}^{\mu} d\mu \bar{\varrho}.$$

Используя выражения (30.17) и (30.19), получаем

$$P = \frac{2}{3} \varepsilon_k = (6\pi M \lambda^{3/2})^{-1} I_{3/2}(\lambda p_0^2). \quad (30.22)$$

Это соотношение в совокупности с выражением (30.17) дает параметрическое представление зависимости $P(\varrho, T)$. При $\beta \rightarrow \infty$ мы возвращаемся к соотношениям § 6, при $\beta \rightarrow 0$ получаем обычное уравнение Клапейрона $P = \varrho kT$. Оценка погрешности, связанной с неоднородностью распределения, приводит к результату

$$\delta P \approx \theta Z^{2/3} \varrho^{4/3},$$

где коэффициент θ определен в § 6. Подчеркнем, что δP явно не зависит от температуры.

Приведем некоторые результаты, касающиеся вклада в давление обменных и квантовых эффектов. Оказывается, что во всей области температур и плотностей квантовая и обменная поправки к давлению отрицательны, причем их отношение не превышает $1/3$. В области вырожденного газа это отношение составляет $2/9$ (см. § 6), в области высоких температур достигает максимальной величины $1/3$.

Что же касается самих выражений для квантовой и обменной поправок, то мы ограничимся областью, где распределение может считаться однородным. В этой области для отношения поправки к самому давлению имеем ($i = 1, 2$):

$$\frac{\delta_i P}{P} = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{e^2 \beta}{a_0} \right)^{1/2} \frac{I_{1/2}^2(x)}{\pi I_{3/2}(x) I'_{1/2}(x)} \times \frac{d}{dx} \left(\frac{\int_{-\infty}^x \Psi_i(x) dx}{I_{1/2}(x)} \right). \quad (30.23)$$

Здесь $x = \lambda p_0^2$ определяется из соотношения (30.17); $\Psi_1 = I_{1/2} I'_{1/2} + (I'_{1/2})^2$, $\Psi_2 = 6 (I'_{1/2})^2$; индекс 1 относится к квантовой, 2 — к обменной поправке. В области низких температур

$$\frac{\delta_1 P}{P} = -\frac{5}{18\pi (3\pi^2)^{1/3} \varrho^{1/3} a_0}$$

что соответствует результатам § 6. В области же высоких температур

$$\frac{\delta_1 P}{P} = -\frac{\pi}{6} \varrho \left(\frac{e^2 \beta}{a_0} \right)^2 a_0^3.$$

Соответствующие обменные поправки получаются отсюда простым пересчетом.

Полученные результаты могут быть использованы для выяснения области применимости квазиклассического уравнения состояния вещества.

§ 31. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

31. 1. Ограничиться приближением Хартри — Фока при решении статистической задачи можно далеко не во всех случаях. Поэтому, как и в квантовой механике, необходимо решить вопрос о способах учета корреляционного взаимодействия между частицами.

Рассматривая выражение для функции Грина (29.16), нетрудно видеть, что взаимодействие между частицами входит в это выражение двояким образом. С одной стороны, взаимодействие сказывается на операторах ψ_r , ψ_r^+ , с другой стороны, от него существенно зависит оператор ξ , осуществляющий статистическое

усреднение. В дальнейшем будет сформулирован единый метод учета взаимодействия в обоих его проявлениях.

В этом параграфе мы рассмотрим только статистический оператор ξ . Помимо изложения методических приемов, развитых впервые Матцубара [129], мы получим возможность построить термодинамику системы взаимодействующих частиц.

Рассмотрим выражение для статистического оператора

$$\xi = \exp [-\beta (H - \mu N)], \quad (31. 1)$$

где операторы H и N взяты в представлениях вторичного квантования и Шредингера и имеют вид, совпадающий с приведенным в § 3. В операторах поля $\psi(q)$ и $\psi^+(q)$ в статистике удобно произвести разбиение на рождающую и уничтожающую части иным образом, чем это было сделано в § 8. Именно, положим

$$\left. \begin{aligned} \psi(q) &= \sum_{\nu} \chi_{\nu}(q) [(1 - \sqrt{n_{\nu}}) a_{\nu} + \sqrt{n_{\nu}} b_{\nu}^+], \\ \psi^+(q) &= \sum_{\nu} \chi_{\nu}^*(q) [(1 - \sqrt{n_{\nu}}) a_{\nu}^+ + \sqrt{n_{\nu}} b_{\nu}], \end{aligned} \right\} \quad (31. 2)$$

где $n_{\nu} = \{\exp [\beta (\varepsilon_{\nu} - \mu) + 1]^{-1}$. Операторы a_{ν} , a_{ν}^+ и b_{ν} , b_{ν}^+ будем называть операторами частиц и дырок в следующем смысле. При рассмотрении основного состояния системы, распределение частиц по уровням которого давалось формулой $n_{\nu} = \theta (\varepsilon_F - \varepsilon_{\nu})$, дыркой считался свободный уровень ниже границы Ферми, частицей — выше границы Ферми. При отличной от нуля температуре среднее заполнение частиц описывается приведенным выше выражением для $n_{\nu}(\beta)$. В этом случае уже нет четкого разделения областей, где могут находиться частицы и дырки. В принципе на каждом уровне имеется вероятность обнаружить как частицу, так и дырку. Факторы $\sqrt{n_{\nu}}$ и $1 - \sqrt{n_{\nu}}$ отражают это обстоятельство, переходя при $\beta \rightarrow \infty$ в $\theta (\varepsilon_F - \varepsilon_{\nu})$ и $\theta (\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_F)^*$.

Будем говорить о нормальном произведении операторов поля в том же смысле, что и выше, принимая новое разбиение операторов на рождающую и уничтожающую части. Легко видеть, что

$$\psi^+(q') \psi(q) = N [\psi^+(q') \psi(q)] + R(q, q'),$$

где $R(q, q')$ — матрица плотности (30. 8). Аналогично обобщается соотношение (8. 10) для N — произведения четырех операторов поля. Тем самым оправдывается выбор коэффициентов $\sqrt{n_{\nu}}$ и $1 - \sqrt{n_{\nu}}$ в выражении (31. 2).

* Необходимость введения корня из n_{ν} связана с тем, что оператор n_{ν} представляет собой билинейную комбинацию ψ и ψ^+ .

Полученные соотношения позволяют получить выражения для гамильтониана и оператора числа частиц

$$H = H_0 + H', \quad (31.3)$$

$$H_0 = E_0 + \int dq N [\psi^+(q)(T + W)\psi(q)], \quad (31.4)$$

$$H' = \frac{1}{2} \int dq dq' N [\psi^+(q)\psi^+(q')V\psi(q')\psi(q)], \quad (31.5)$$

$$N = N + \int dq N [\psi^+(q)\psi(q)]. \quad (31.6)$$

Здесь E_0 — средняя энергия в приближении Хартри — Фока; N — среднее число частиц в системе. Приведенные соотношения дают разбиение полного гамильтониана системы на гамильтониан нулевого приближения H_0 и гамильтониан возмущения H' .

Перепишем выражение (31.1) в виде

$$\xi = \exp[-\beta(H_0 - \mu N + H')]. \quad (31.1')$$

Если по величине β , которую мы считаем переменной, формально продифференцировать обе части выражения (31.1'), то мы получим так называемое уравнение Блоха

$$-\frac{\partial \xi}{\partial \beta} = (H_0 - \mu N + H') \xi, \quad (31.7)$$

которое аналогично уравнению Шредингера с заменой $it \rightarrow \beta$. Из этой аналогии и исходил Матцубара.

31.2. Цель последующего изложения состоит в построении своеобразного «представления взаимодействия по температуре», что позволит ввести стандартную диаграммную технику для вычисления шнура оператора ξ .

В пренебрежении корреляционным взаимодействием этот оператор имеет вид

$$\xi_0(\beta) = \exp[-\beta(H_0 - \mu N)]. \quad (31.8)$$

Представим $\xi(\beta)$ в виде

$$\xi(\beta) = \xi_0(\beta) \mathcal{S}(\beta), \quad (31.9)$$

где $\mathcal{S}(\beta)$ — некоторый неизвестный оператор. Тогда для \mathcal{S} получается уравнение*

$$-\frac{\partial \mathcal{S}(\beta)}{\partial \beta} = H'(\beta) \mathcal{S}(\beta), \quad (31.10)$$

где

$$H'(\beta) = \xi_0^{-1}(\beta) H' \xi_0(\beta). \quad (31.11)$$

Здесь отчетливо видна аналогия с переходом в обычное представление взаимодействия в квантовой механике: $\mathcal{S}(\beta)$ является аналогом S -матрицы, $\xi_0(\beta)$ — аналогом оператора перехода $\exp(-iH_0 t)$.

* Дифференцировать нужно только по параметру β , стоящему в экспоненте. Кроме того, H_0 и H' зависят от реальной обратной температуры системы β , которую в дальнейшем мы будем обозначать через β_0 .

Учитывая очевидное граничное условие

$$\xi(0) = \xi_0(0) = 1,$$

имеем

$$S(0) = 1. \quad (31.12)$$

Можно, таким образом, сказать, что $S(\beta)$ описывает «эволюцию системы по температуре» от точки $\beta = 0$, где взаимодействие никакой роли не играет*, до значения β .

Формальная тождественность (с точностью до замены $it \rightarrow \beta$) уравнения (31.10) и уравнения для обычной S -матрицы позволяет сразу написать представление $S(\beta)$ в виде суммы T -произведений

$$S(\beta_0) = T \exp \left\{ - \int_0^{\beta_0} d\beta H'(\beta) \right\} \quad (31.13)$$

или

$$S(\beta_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta_0} d\beta_1 \dots d\beta_n T [H'(\beta_1) \dots H'(\beta_n)].$$

Здесь хронологизацию нужно понимать в смысле упорядочения по параметру β : все сомножители под знаком T -произведения должны быть расположены в порядке возрастания β справа налево.

Зная $S(\beta_0)$, можно получить полную термодинамическую информацию о рассматриваемой системе. Обозначая через $Z_0 = \text{Sp}(\xi_0)$ статистическую сумму системы в приближении Хартри—Фока, можно написать

$$\frac{Z}{Z_0} = \frac{\text{Sp}(\xi)}{\text{Sp}(\xi_0)} \equiv \langle S(\beta_0) \rangle_0. \quad (31.14)$$

Здесь символ $\langle \dots \rangle_0$ означает усреднение по статистическому оператору приближения Хартри—Фока.

Таким образом, для нахождения статистической суммы, а следовательно, и остальных термодинамических величин, необходимо знать среднее значение S -матрицы $S(\beta_0)$. Выражение (31.13) служит исходным пунктом последующих построений.

31.3. Теперь надо исключить «виртуальные» операторы и свети T -произведения к N -произведениям.

Запишем операторы поля в представлении взаимодействия по температуре в явной форме

$$\left. \begin{aligned} \psi(q, \beta) &= \xi_0^{-1} \psi(q) \xi_0 = \\ &= \sum_{\nu} [a_{\nu} (1 - \sqrt{n_{\nu}}) + b_{\nu}^{\dagger} \sqrt{n_{\nu}}] \exp[-\beta(\epsilon_{\nu} - \mu)], \\ \psi^{\dagger}(q, \beta) &= \sum_{\nu} [a_{\nu}^{\dagger} (1 - \sqrt{n_{\nu}}) + b_{\nu} \sqrt{n_{\nu}}] \exp[\beta(\epsilon_{\nu} - \mu)]. \end{aligned} \right\} \quad (31.15)$$

* При бесконечно высокой температуре всякая система многих частиц (рассматриваемая нерелятивистским образом) превращается в идеальный газ. Это обстоятельство, полностью соответствует выключению взаимодействия при $t = \pm \infty$ в квантовой механике и является менее формальным, чем адиабатическая гипотеза.

Здесь использованы правила перестановки

$$[H_0, \mathbf{a}_v] = -\varepsilon_v \mathbf{a}_v, \quad [H_0, \mathbf{a}_v^+] = \varepsilon_v \mathbf{a}_v^+$$

и т. д. Операторы $\psi^+(q, \beta)$ и $\psi(q, \beta)$ уже не являются эрмитово сопряженными по отношению друг к другу. Однако это обстоятельство, связанное с неунитарным характером оператора ξ_0 , несущественно.

Для операторов $\psi(q, \beta)$, $\psi^+(q, \beta)$ можно ввести понятие об их нормальном произведении, которое определяется тем же способом, что и выше. Гамильтониан возмущения $H'(\beta)$, входящий в соотношении предыдущего раздела, можно тогда записать в виде

$$H'(\beta) = \frac{1}{2} \int dq dq' N [\psi^+(q, \beta) \psi^+(q', \beta) V \psi(q', \beta) \psi(q, \beta)]. \quad (31.16)$$

И здесь текущий параметр β отличается от реальной температуры системы, входящей в n_v .

Важным является вопрос о среднем значении нормального произведения. В квантовой механике эта величина обращалась в нуль при усреднении по основному состоянию системы, что чрезвычайно облегчало выкладки. В нашем случае дело обстоит сложнее ввиду того, что усреднение охватывает все состояния, в том числе и состояния с отличным от нуля числом частиц и дырок. Тем не менее можно положить

$$\langle N [\psi(I) \psi^+(II) \dots] \rangle_0 = 0, \quad (31.17)$$

где римскими цифрами здесь и далее обозначена совокупность координат q и обратной температуры β .

Рассмотрим сначала N -произведение пары операторов. Поскольку при усреднении по каждой из конфигураций Ψ_{0n} обкладки слева и справа одинаковы, достаточно рассмотреть лишь выражение $\langle N [\psi^+(I) \psi(II)] \rangle_0$, причем по той же причине в нем существенны лишь два члена

$$\langle [\psi^+(I)_{(+)} \psi(II)_{(-)} - \psi(II)_{(+)} \psi^+(I)_{(-)}] \rangle_0.$$

Подставляя сюда разложения (31.15), найдем

$$\langle N [\psi^+(I) \psi(II)] \rangle_0 = \sum_v \chi_v^*(q_1) \chi_v(q_2) \times$$

$$\times \exp[(\beta_1 - \beta_2)(\varepsilon_v - \mu)] \{ \langle \mathbf{a}_v^+ \mathbf{a}_v \rangle_0 (1 - \sqrt{n_v})^2 - \langle \mathbf{b}_v^+ \mathbf{b}_v \rangle_0 n_v \}. \quad (31.18)$$

Величина n_v представляет собой среднее значение оператора $A_v^+ A_v$ (см. § 3) или, после перехода к дырочному описанию,

$$n_v = \langle A_v^+ A_v \rangle = (1 - \sqrt{n_v})^2 \langle \mathbf{a}_v^+ \mathbf{a}_v \rangle_0 + n_v \langle \mathbf{b}_v \mathbf{b}_v^+ \rangle_0.$$

Отсюда, учитывая $\langle \mathbf{b} \mathbf{b}^+ \rangle_0 = 1 - \langle \mathbf{b}^+ \mathbf{b} \rangle_0$, имеем

$$(1 - \sqrt{n_v})^2 \langle \mathbf{a}_v^+ \mathbf{a}_v \rangle_0 = n_v \langle \mathbf{b}_v^+ \mathbf{b}_v \rangle_0.$$

что и доказывает равенство нулю выражения (31. 18). Исходя из этого, можно написать

$$\langle N (A_v^+ A_v) \rangle_0 = 0, \quad (31. 17')$$

т. е. теорема (31. 17) справедлива и для отдельных слагаемых, отвечающих определенному состоянию v .

Разложим в общем выражении

$$\langle N (\psi^+ (I) \psi (II) \dots) \rangle_0$$

каждый оператор по состояниям v . Получим сумму членов; дальнейшее рассмотрение относится к любому из них. Если в одном из членов имеется по крайней мере пара одинаковых операторов $A_v A_v$ или $A_v^+ A_v^+$, то он тождественно обратится в нуль из-за свойств перестановки этих операторов. Важен, таким образом, случай, когда операторы входят парами, относящимися к разным состояниям.

$$\langle N (A_v^+ A_{v'} A_v^+ A_{v'} \dots) \rangle_0.$$

Но статистическое усреднение в приближении Хартри — Фока происходит независимо по разным состояниям. Поэтому последнее выражение, в котором из-за $v \neq v'$ возможно произвольное расположение операторов разных пар друг относительно друга, сводится к произведению $\langle N (A_v^+ A_v) \rangle_0 \langle N (A_{v'}^+ A_{v'}) \rangle_0, \dots$, т. е. в силу равенства (31. 17') мы приходим к нулевому результату. Теорему, таким образом, можно считать доказанной.

31. 4. Далее следует ввести понятие о температурной свертке операторов поля в представлении взаимодействия. Определим ее обычным образом (T — символ упорядочения по β)

$$\psi (I) \widehat{\psi}^+ (II) = T (\psi \psi^+) - N (\psi \psi^+) = \langle T (\psi \psi^+) \rangle_0. \quad (31. 19)$$

Здесь мы использовали доказанную выше теорему. Основные свойства свертки, отмеченные в § 10, сохраняют в данном случае свою силу. Прямое вычисление дает

$$\begin{aligned} \psi (I) \widehat{\psi}^+ (II) &= \sum_v \chi_v^* (q_2) \chi_v (q_1) \times \\ &\times \exp [-(\varepsilon_v - \mu) (\beta_1 - \beta_2)] \begin{cases} 1 - n_v & \beta_1 > \beta_2 \\ -n_v & \beta_1 < \beta_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (31. 20)$$

Это выражение может быть получено из соотношения (10. 5) заменой $it_{1,2} \rightarrow \beta_{1,2}$, $\varepsilon_v \rightarrow \varepsilon_v - \mu^*$.

* Все свелось бы просто к замене $it_{1,2} \rightarrow \beta_{1,2}$, если бы мы определили операторы в представлении взаимодействия с помощью оператора перехода $U = \exp [i (H_0 - \mu N) t]$, как это часто в статистике и делается. Аналогично, для перехода в гейзенберговское представление может служить оператор $U = \exp [i (H - \mu N) t]$. Отметим, что в физические величины обычно входят разности энергии, так что указанное различие несущественно.

Правила Вика, отражающие общие алгебраические свойства операторов, остаются в силе и в квантовой статистике. Таким образом, можно исключить виртуальные операторы, сведя T -произведения в разложении $\mathcal{S}(\beta)$ к нормальным произведениям.

В температурной теории можно в полной мере использовать диаграммную технику; это является важнейшим преимуществом полевого подхода по сравнению со старой термодинамической теорией возмущений. Правила Фейнмана в координатном представлении испытывают лишь следующие изменения:

- а) фактор $(-i)^n$ заменяется на $(-1)^n$;
- б) интегрирование по времени от $-\infty$ до ∞ заменяется интегрированием по β от 0 до β_0 ;
- в) обычные свертки операторов заменяются температурными.

Правила Фейнмана в импульсном представлении, наиболее удобные для практических приложений к описанию пространственно-однородных систем, будут рассмотрены в следующем разделе.

Вернемся к задаче о вычислении статистической суммы и рассмотрим выражение:

$$\frac{Z}{Z_0} = \langle \mathcal{S}(\beta_0) \rangle_0.$$

Из теоремы о равенстве нулю среднего значения всякого N -произведения (кроме, разумеется, $N(1) = 1$), видно, что из всех диаграмм теории возмущений в Z дадут вклад только диаграммы вакуумных переходов. Такие диаграммы можно записать в виде экспоненты (см. § 14).

$$\frac{Z}{Z_0} = \exp(L),$$

где L — сумма всех связанных диаграмм вакуумных переходов. Так можно прийти к простому выражению для термодинамического потенциала Ω

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta} L, \quad (31.21)$$

где Ω_0 — термодинамический потенциал в приближении Хартри—Фока.

31.5. Основное отличие диаграммной техники в импульсном представлении при $T \neq 0$ от техники, рассмотренной в § 13, заключается в наличии конечных пределов интегрирования по β . В остальных отношениях соответствующие правила Фейнмана сохраняют свою силу.

Рассмотрим свободную температурную функцию Грина

$$G_0(I, II) = -i\psi(I)\widehat{\Psi}^+(II). \quad (31.22)$$

Эта величина зависит лишь от разности $\beta = \beta_1 - \beta_2$ и как функция этой разности определена в интервале от $-\beta_0$ до β_0 .

Целесообразно периодически продолжить G_0 по переменной β по всей оси β . Тогда $G_0(q_1, q_2, \beta)$ можно разложить в ряд Фурье по переменной β

$$G_0(q_1, q_2, \beta) = \frac{1}{\beta_0} \sum_n G_0(q_1, q_2, \varepsilon_n) \exp(-i\varepsilon_n \beta), \quad (31.23)$$

где

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta_0}^{\beta_0} d\beta G_0(q_1, q_2, \beta) \exp(i\varepsilon_n \beta). \quad (31.24)$$

Для нахождения допустимых значений ε_n можно воспользоваться равенством

$$G_0(q_1, q_2, \beta) = -G_0(q_1, q_2, \beta + \beta_0). \quad (31.25)$$

Подстановка в это равенство разложения (31.23) дает

$$\sum_n G_0(q_1, q_2, \varepsilon_n) [\exp(-i\varepsilon_n \beta_0) + 1] \exp(-i\varepsilon_n \beta) = 0,$$

откуда $\exp(-i\varepsilon_n \beta_0) = -1$ и

$$\varepsilon_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta_0}. \quad (31.26)$$

Фактически это условие справедливо и для точной функции Грина.

Для доказательства равенства (31.25) воспользуемся соотношениями (31.15). При $\beta_1 > \beta_2$ можно написать (знаменатель $\text{Sp}(\xi_0)$ подразумевается)

$$G_0(q_1, q_2, \beta) = \text{Sp}[\xi_0(\beta_0) \xi_0^{-1}(\beta_1) \Psi(q_1) \xi_0(\beta_1) \xi_0^{-1}(\beta_2) \Psi^+(q_2) \xi_0(\beta_2)],$$

или, учитывая возможность перестановки операторов под знаком шпура и очевидные соотношения

$$\xi_0(\beta_1) \xi_0(\beta_2) = \xi_0(\beta_1 + \beta_2), \quad \xi_0(\beta) \xi_0(-\beta) = 1,$$

$$G_0(q_1, q_2, \beta) = \text{Sp}[\xi_0(\beta_0) \xi_0^{-1}(\beta) \Psi(q_1) \xi_0(\beta) \Psi^+(q_2)].$$

Здесь $\beta = \beta_1 - \beta_2$. Переставляя последние два сомножителя налево, найдем

$$G_0(q_1, q_2, \beta) = \text{Sp}[\xi_0(\beta_0) \xi_0^{-1}(-\beta + \beta_0) \Psi^+(q_2) \xi_0(-\beta + \beta_0) \Psi(q_1)].$$

При $\beta_1 < \beta_2$

$$G_0(q_1, q_2, \beta) = -\text{Sp}[\xi_0(\beta_0) \xi_0^{-1}(-\beta) \Psi^+(q_2) \xi_0(-\beta) \Psi(q_1)].$$

Отсюда при $\beta < 0$

$$G_0(q_1, q_2, \beta) = -G_0(q_1, q_2, \beta + \beta_0).$$

Условие циклического продолжения делает это соотношение справедливым при любых β .

Переход в импульсное представление в выражении для функции Грина дает

$$G_0(q_1, q_2, \varepsilon_n) = \sum_{\nu} \frac{\chi_{\nu}^*(q_2) \chi_{\nu}(q_1)}{i\varepsilon_n + \mu - \varepsilon_{\nu}}. \quad (31.27)$$

Далее, все интегралы по β , входящие в выражения для матричных элементов, можно распространить от $-\beta_0$ до β_0 , вводя фактор $1/2$. Кроме того, оказывается, что δ -функция от суммы энергий в каждом узле диаграммы заменяется на кронекеровский символ $\delta_{0, \Sigma \varepsilon_n}$, который отличается от нуля лишь в том случае, если сумма частот, отвечающих сходящимся в этом узле линиям, равна нулю [14].

В заключение можно сказать, что выражение для матричного элемента $S(\beta)$ получается из аналогичного выражения при $T = 0$ заменой всех частот ε на $i\varepsilon_n \left[\varepsilon_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta_0} \right]$ и переходом от интегрирования по частотам к суммированию по n

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rightarrow -\frac{i}{\beta_0} \sum_n.$$

Правила вычисления соответствующих сумм изложены в работе [11]. В основе этих правил лежит то соображение, что суммирование по частотам можно заменить вычислением некоторого контурного интеграла, в который введена функция $\operatorname{tg}\left(\frac{\omega\beta_0}{2}\right)$, имеющая полюса в нужных точках. В этом случае искомая сумма получается, как сумма вычетов подынтегрального выражения.

§ 32. МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ

32. 1. Термодинамическая теория возмущений недостаточна для решения всех типов задач, с которыми приходится иметь дело в квантовой статистике.

С одной стороны, развитый выше аппарат способен дать информацию лишь о чисто термодинамических характеристиках системы — термодинамических потенциалах, их производных и т. п. Такие интегральные характеристики, хотя и играют важную роль, далеко не исчерпывают тех сведений о системе, которыми желательно располагать. Имеются в виду, во-первых, характеристики локального типа (распределение средних значений динамических переменных, корреляционные функции, кинетические коэффициенты и т. п.), во-вторых, характеристики спектра возмущений системы.

С другой стороны, даже если ограничиться чисто термодинамическими характеристиками, учет нескольких первых диаграмм теории возмущений может оказаться недостаточным. В квантовой

статистике может быть проведен такой же анализ относительной роли диаграмм теории возмущений, какой был выполнен в § 16 для случая нулевой температуры. При выполнении условия

$$\frac{\beta \varrho^{2/3}}{M} \geq 1,$$

где ϱ — средняя плотность вещества, указанный анализ сохраняет свою силу. В случае предельно высоких температур

$$\frac{\beta \varrho^{2/3}}{M} \gg 1$$

в параметре взаимодействия следует сделать замену $p_0 \rightarrow (M/\beta)^{1/2}$. Для пояснения заметим, что кинетическая энергия частицы определяется наибольшей из величин p_0/M и $1/\beta$.

При отличной от нуля температуре может возникнуть такая ситуация, при которой требуется эффективное суммирование некоторой бесконечной последовательности диаграмм теории возмущений.

Для решения поставленных вопросов вводятся температурные и температурно-временные функции Грина.

32. 2. Температурная функция Грина вводится путем непосредственного обобщения понятия температурной свертки операторов (точнее, свободной температурной функции Грина) с учетом корреляционного взаимодействия частиц

$$G(I, II) = -i \frac{\text{Sp} \{ \xi T [\psi_r(I) \psi_r^+(II)] \}}{\text{Sp}(\xi)}. \quad (32. 1)$$

Здесь введены «гейзенберговские по температуре» операторы

$$\psi_r(I) = \exp [\beta_1 (H - \mu N)] \psi(q_1) \exp [-\beta_1 (H - \mu N)],$$

эволюция которых при изменении β определяется не H_0 , как это было для оператора $\psi(I)$, а полным гамильтонианом H^* .

Учитывая определение (31. 9), после несложных выкладок находим

$$G(I, II) = -i \frac{\langle T [\psi(I) \psi^+(II) S(\beta_0)] \rangle_0}{\langle S(\beta_0) \rangle_0}. \quad (32. 2)$$

Здесь $S(\beta_0)$ — полная S -матрица, взятая в интервале от 0 до β_0 — реальной обратной температуры системы. Аналогичным образом вводится и парная функция Грина

$$G(I, II, III, IV) = \frac{\langle T [\psi(I) \psi(II) \psi^+(III) \psi^+(IV) S] \rangle_0}{\langle S \rangle_0}. \quad (32. 3)$$

* Обращаем внимание на аналогию последнего соотношения с общими соотношениями § 2. Лишние по сравнению с прежним определением множителя $\exp [\pm \mu \beta N]$ приводят к появлению дополнительного фактора $\exp [-\mu (\beta_1 - \beta_2)]$ (см. раздел 32. 3.)

Если функции Грина известны, то извлечь из них информацию, касающуюся распределений вероятностей, корреляционных свойств и т. п., можно обычным способом. В частности, одночастичная матрица плотности системы имеет вид

$$R(q_1, q_2) = -i \lim_{\beta_2 - \beta_1 \rightarrow +0} G(I, II). \quad (32.4)$$

Несколько более сложным путем получается информация о спектре возбуждений системы. Для этого надо располагать обычной временной функцией Грина (см. § 29). Оказывается, что значение температурной функции Грина позволяет непосредственно построить временную функцию Грина. Это достигается аналитическим продолжением $G(I, II)$ по переменной $\beta_1 - \beta_2$ в комплексную плоскость.

Сопоставим выражения для температурной и временной функций Грина

$$G_\beta(q_1, \beta_1, q_2, \beta_2) = -i \frac{\{ \text{Sp} \{ \xi T \{ \exp(H - \mu N) \beta_1 \} \Psi(q_1) \exp \{ - (H - \mu N) \times \} \times (\beta_1 - \beta_2) \} \Psi^+(q_2) \exp \{ - (H - \mu N) \beta_2 \} \} \}}{\text{Sp}(\xi)}, \quad (32.5)$$

$$G_t(q_1, t_1, q_2, t_2) = -i \frac{\text{Sp} \{ \xi T \{ \exp(iHt_1) \Psi(q_1) \exp \{ - iH(t_1 - t_2) \} \Psi^+(q_2) \exp(-iHt_2) \} \}}{\text{Sp}(\xi)}, \quad (32.6)$$

где введены для удобства индексы β и t . Преобразуем далее выражение для G_t , используя соотношения

$$\left. \begin{aligned} \exp(-i\mu Nt) \Psi(q) \exp(i\mu Nt) &= \Psi(q) \exp(i\mu t), \\ \exp(-i\mu Nt) \Psi^+(q) \exp(i\mu Nt) &= \Psi^+(q) \exp(-i\mu t), \end{aligned} \right\} \quad (32.7)$$

для доказательства которых учтем правила коммутации (3.15) (см. также приложение Б)

$$\exp(-i\mu Nt) \Psi(q) \exp(i\mu Nt) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\mu t)^n}{n!} \Psi(q).$$

Тогда

$$G_t(q_1, t_1, q_2, t_2) = -i \frac{\{ \text{Sp} \{ \xi T \{ \exp[i(H - \mu N)t_1] \Psi(q_1) \exp \{ - i(H - \mu N) \times \} \times (t_1 - t_2) \} \Psi^+(q_2) \exp \{ - i(H - \mu N)t_2 \} \} \}}{\text{Sp}(\xi)}.$$

Из приведенных соотношений следует, что аналитическое продолжение функции $G_\beta(I, II)$ на мнимую ось $\beta_1 \rightarrow it_1$, $\beta_2 \rightarrow it_2$ дает при $\beta_1 > \beta_2$ функцию $G_t(1, 2) \exp(i\mu(t_1 - t_2))$ с $t_1 > t_2$, а при $\beta_1 < \beta_2$ функцию $G_t(1, 2) \exp(i\mu(t_1 - t_2))$ с $t_1 < t_2$. Так находят временную функцию Грина по температурной в координатном представлении.

Рассмотрим теперь соответствующий переход для компонент Фурье обеих рассматриваемых функций*

$$G_{\beta}(q_1, q_2, \varepsilon_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta_0}^{\beta_0} d(\beta_1 - \beta_2) G_{\beta}(I, II) \exp[i\varepsilon_n(\beta_1 - \beta_2)],$$

$$\{G_t(I, 2) \exp[i\mu(t_1 - t_2)]\}_{\varepsilon} = G_t(q_1, q_2, \varepsilon \div \mu),$$

где $G_t(q_1, q_2, \varepsilon)$ — фурье-образ функции Грина $G_t(I, 2)$. Приведенные соотношения непосредственно непригодны для аналитического продолжения. Для этого удобно использовать спектральные представления.

32.3. Получим предварительно спектральную формулу для температурной функции Грина. Вводя полную промежуточную систему функций в соотношение (32.1), найдем

$$G_{\beta}(I, II) = -i \sum_{m, n} \exp[\beta_0(\Omega + \mu N_n - E_n) + (E_n - E_m - \mu) \times \\ \times (\beta_1 - \beta_2)] \langle n | \Psi(q_1) | m \rangle \langle m | \Psi^+(q_2) | n \rangle \times \\ \times \begin{cases} 1 & \beta_1 > \beta_2 \\ -\exp[\beta_0(E_n - E_m - \mu)] & \beta_1 < \beta_2. \end{cases}$$

Переходя к интеграции по $E = E_m - E_n$ и вводя $\beta = \beta_1 - \beta_2$, можно написать

$$G_{\beta}(q_1, q_2, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} dEA(q_1, q_2, E) \times \\ \times \begin{cases} \exp[-\beta(E - \mu)] & \beta_0 > \beta > 0 \\ -\exp[-(\beta + \beta_0)(E - \mu)] & 0 > \beta > -\beta_0. \end{cases}$$

Заменяя β на it ($t = t_1 - t_2$), получим выражение для временной функции Грина

$$G_t(q_1, q_2, t) \exp(i\mu t) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} dEA(q_1, q_2, E) \begin{cases} \exp[-it(E - \mu)] & t > 0 \\ -\exp[-(it + \beta_0)(E - \mu)] & t < 0. \end{cases}$$

Спектральные плотности в соотношениях для G_{β} и G_t одинаковы. Перейдем к фурье-образам этих функций. Несложные расчеты дают

$$G_{\beta}(q_1, q_2, \varepsilon_n) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{A(q_1, q_2, E) \{\exp[-\beta_0(E - \mu)] + 1\}}{i(E - \mu) + \varepsilon_n},$$

$$G_t(q_1, q_2, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dEA(q_1, q_2, E) \times \\ \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon - E + i\delta} + \frac{\exp[-\beta_0(E - \mu)]}{\varepsilon - E - i\delta} \right\}.$$

* Здесь по-прежнему $\varepsilon_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$.

Из сопоставления этих соотношений видно, что особенности аналитического продолжения функции $G_t(q_1, q_2, \varepsilon)$, дающие характеристики квазичастиц, определяются особенностями аналитического продолжения температурной функции $G_\beta(q_1, q_2, \varepsilon_n)$ по переменной ε_n .

В самом деле, в комплексной плоскости ε можно опустить добавки $\pm i\delta$ в последней формуле и написать символическое равенство

$$G_t(q_1, q_2, \varepsilon) = -iG_\beta(q_1, q_2, \varepsilon_n) \Big|_{\varepsilon_n \rightarrow i(\mu - \varepsilon)}, \quad (32.8)$$

которое означает, что для получения фурье-образа временной функции Грина достаточно аналитически продолжить фурье-образ температурной функции Грина в точку $\varepsilon_n = i(\mu - \varepsilon)$. Возможность и однозначность такого продолжения гарантируются наличием бесконечной последовательности точек определения $G_\beta(\varepsilon_n)$, имеющей точку сгущения на бесконечности. Полюса аналитического продолжения функций $G(\varepsilon_n)$ дают одновременно и полюса функции $G(\varepsilon)$. Таким образом, в температурных функциях Грина содержится вся необходимая информация о равновесной системе многих частиц.

32. 4. Остановимся на вопросе о представлении термодинамического потенциала Ω с помощью температурных функций Грина. Такое представление дает возможность провести эффективное суммирование подлежащих учету диаграмм теории возмущений.

Проводимое далее рассмотрение совпадает в основных чертах с расчетами, содержащимися в § 15 и 19. Заменяем гамильтониан взаимодействия H' на $\lambda H'$ и продифференцируем по λ соотношения

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta_0} \ln \langle S \rangle_0,$$

учитывая, что Ω_0 и обкладки оператора S не зависят от λ . Это дает

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = - \frac{\langle \partial S / \partial \lambda \rangle_0}{\beta_0 \langle S \rangle_0}. \quad (32.9)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} T \left\{ \exp \left[- \lambda \int_0^{\beta_0} d\beta H'(\beta) \right] \right\} = \\ &= - \int_0^{\beta_0} d\beta T [H'(\beta) S(\beta_0)]. \end{aligned}$$

Очевидно, что проведение дополнительной хронологизации под знаком T -произведения не меняет результата. Таким образом, с учетом $\Omega|_{\lambda=0} = \Omega_0$ можно написать

$$\Omega = \Omega_0 + \frac{1}{\beta_0} \int_0^1 d\lambda \int_0^{\beta_0} d\beta \frac{\langle T [H'(\beta) S(\beta_0)] \rangle_0}{\langle S(\beta_0) \rangle_0}. \quad (32.10)$$

Обозначая подынтегральное выражение в этом соотношении через Q и применяя метод, приведший к уравнению (32. 2), получим

$$Q(\beta) = \frac{\text{Sp} [\xi H'_r(\beta)]}{\text{Sp}(\xi)}.$$

Дальнейшие рассуждения такие же, что и в разделе 15. 3. Единственное отличие состоит в замене оператора $i \frac{\partial}{\partial t}$ на $-\frac{\partial}{\partial \beta} - \mu$, возможность которой вытекает из сопоставления уравнения движения оператора $\Psi_r(I)$

$$\frac{\partial}{\partial \beta_1} \Psi_r(I) = [H - \mu N, \Psi_r(I)]$$

или $(\beta_1 = \beta_2)$

$$-\left(\frac{\partial}{\partial \beta_1} + T + \mu\right) \Psi_r(I) = \lambda \int dq_2 V(q_1, q_2) \Psi_r^\dagger(II) \Psi_r(II) \Psi_r(I)$$

с уравнением (3. 28). Поэтому величину Q можно выразить только через одночастичную функцию Грина

$$Q(\beta) = -\frac{i}{2\lambda} \int dq_1 \lim_{II \rightarrow I} \left[\frac{\partial}{\partial \beta_1} + \mu - T - (1 + \lambda) W \right] \times \\ \times [G(I, II) - G_0(I, II)].$$

Далее, как и при квантовомеханическом рассмотрении, разлагаем $S(\beta)$ по нормальным произведениям (§ 14), подставляем это разложение в уравнение (32. 2) и вводим температурный массовый оператор $M(I, II)$, который описывается диаграммами того же типа, что и аналогичная величина при $T = 0$ (§ 19). В результате приходим к температурному аналогу уравнения Дайсона, имеющего в дифференциальной форме следующий вид

$$-\left(\frac{\partial}{\partial \beta} + \mu + T + W\right) G(I, II) = \int dIII M(I, III) G(III, II), \quad (32. 11)$$

где введено обозначение $\int dI \equiv \int dq_1 \int_0^{\beta_0} d\beta_1$. Используя полученное уравнение, имеем окончательно [127, 130]

$$\Omega = \Omega_0 + \frac{1}{\beta_0} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \left\{ \int dI dII M(I, II) G(II, I) - \right. \\ \left. - \int dI \lim_{II \rightarrow I \beta_2 - \beta_1 \rightarrow +0} \lambda W [G(I, II) - G_0(I, II)] \right\}. \quad (32. 12)$$

§ 33. ПРИЛОЖЕНИЯ К ТЕОРИИ ПЛАЗМЫ

33. 1. Рассмотрим некоторые вопросы динамической теории плазмы (полностью ионизованного газа, состоящего из электронов и, для определенности, протонов). Перевести обычный водород

в такое состояние можно различными способами, подвергая его либо сильному нагреванию, либо сильному сжатию (§ 6). Мы остановимся на случае горячей плазмы. При этом температура плазмы должна по крайней мере совпадать по порядку величины с ионизационным потенциалом водорода

$$kT \sim e^2/a_0. \quad (33.1)$$

Ограничиваясь случаем слабого взаимодействия, положим (§ 1)

$$\alpha \sim \frac{e^2}{dkT} \ll 1. \quad (33.2)$$

Следовательно, мы рассматриваем сжатую систему с кулоновским взаимодействием. В § 1 уже подчеркивалось, что такая система в обычном смысле слова является разреженной.

Из условий (33.1) и (33.2) следует, что параметр $\frac{q^{2/3}}{MkT}$, представляющий собой отношение граничной энергии электронов к их тепловой энергии, мал по сравнению с единицей, т. е.

$$\frac{q^{2/3}}{MkT} \sim \left(\frac{a_0 kT}{e^2} \right) \left(\frac{e^2}{dkT} \right)^2 \ll 1.$$

Это неравенство тем более справедливо для протонного газа. Поэтому фактически мы имеем дело с системой, подчиняющейся бoльцмановской статистике, т. е. числа заполнения уровней следует считать малыми по сравнению с единицей

$$n_\nu = \exp [\beta (\mu - \varepsilon_\nu)] \ll 1, \quad (33.3)$$

а химический потенциал μ — большим по абсолютной величине и отрицательным.

Ввиду однородности и электронейтральности (в целом) плазмы член прямого самосогласованного взаимодействия в приближении Хартри — Фока полностью выпадает. Что же касается малого обменного самосогласованного члена, то его нетрудно получить из соотношения (30.10), если с учетом выражения (33.3) положить

$$q = \exp [\beta (\mu - p^2/2M)].$$

Отсюда

$$C = -\frac{1}{2} \text{Sp} (Wq) = V \frac{e^2}{8\pi^2\beta^2} \left[M_{(e)}^2 \exp (2\beta\mu_{(e)}) + M_{(p)}^2 \exp (2\beta\mu_{(p)}) \right]$$

и

$$\Omega_0 = -\frac{2q}{\beta} \left[1 - \frac{\pi}{8} \beta^2 q e^2 \left(\frac{1}{M_{(p)}} + \frac{1}{M_{(e)}} \right) \right] V, \quad (33.4)$$

где $\mu_{(p, e)}$ — химические потенциалы; $M_{(p, e)}$ — массы; $q_{(p)} = q_{(e)}$ — плотности соответственно протонов и электронов. Здесь принято во внимание то обстоятельство, что обменные эффекты нужно учитывать в отдельности для электронного и протонного распределений.

Динамическая теория плазмы со слабым кулоновским взаимодействием, учитывающая корреляционное взаимодействие между частицами, строилась ранее с помощью метода Дебая — Хюккеля [4]. Этот метод включает в себя процедуру самосогласования, имеющую неясную область применимости. Полевая теория плазмы развита в работе [131]. Физические величины, в частности термодинамический потенциал, представляются в этой теории в виде разложений, которые сходятся тем лучше, чем меньше параметр α . При этом главный член разложений совпадает с выражением, полученным по методу Дебая — Хюккеля. Таким образом, полевая теория плазмы обосновывает, уточняет и указывает границы применимости прежних результатов.

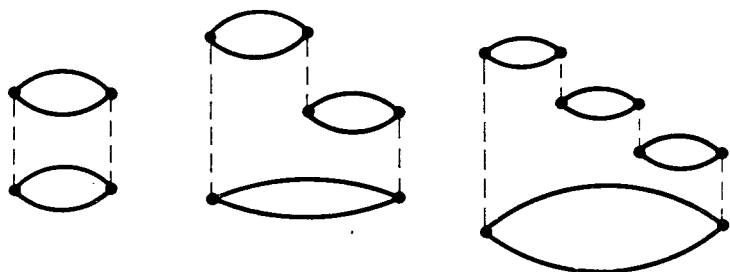


Рис. 67

33. 2. Вычислим главный член корреляционной части термодинамического потенциала. Исходным пунктом служит тот факт, что плазма со слабым взаимодействием между частицами представляет собой сжатую систему. Поэтому анализ температурных диаграмм термодинамической теории возмущений, аналогичный в основных чертах анализу, проведенному в § 16, приводит к тем же результатам: как и во всякой сжатой системе, в плазме наиболее существенны диаграммы, содержащие максимальное число замкнутых петель и имеющие единый малый передаваемый импульс. Подлежащие учету замкнутые диаграммы вакуумных переходов, отвечающие термодинамическому потенциалу Ω (см. § 31), изображены на рис. 67. Такие диаграммы нужно рассматривать в отдельности для электронов и протонов.

Дальнейшее рассмотрение повторяет выкладки, проведенные в § 25 и 27. Вводим эффективный потенциал взаимодействия $\gamma(I, II)$, связанный с истинным кулоновским потенциалом уравнением

$$\gamma(I, II) = \frac{e^2}{r_{12}} \delta(\beta_1 - \beta_2) + \int dIII dIV \frac{e^2}{r_{13}} \times \\ \times \delta(\beta_1 - \beta_3) \Pi(III, IV) \gamma(IV, II), \quad (33.5)$$

где поляризационный оператор Π определяется соотношением

$$\Pi(I, II) = iG_0(I, II) G_0(II, I). \quad (33.6)$$

Массовый оператор сжатой системы связан с эффективным потенциалом γ простым соотношением (см. § 25).

$$M(I, II) = i \left[\gamma(I, II) - \frac{e^2}{r_{12}} \delta(\beta_1 - \beta_2) \right] G_0(I, II). \quad (33.7)$$

Подстановка этого соотношения в выражение (32. 12) и учет соотношения (33. 5) дает следующее выражение для термодинамического потенциала:

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{1}{\beta_0} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int dI dII \left[\gamma(I, II) - \frac{e^2}{r_{12}} \delta(\beta_1 - \beta_2) \right] \times \\ \times \Pi(I, II). \quad (33.8)$$

Переходя в импульсное представление с учетом изложенных в § 31 и 32 правил, получим

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{g^2 V}{\beta_0} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^3 k \sum_n \left[\gamma(\vec{k}, \omega_n) - \right. \\ \left. - \frac{4\pi e^2}{k^2} \right] \Pi(\vec{k}, \omega_n). \quad (33.9)$$

Здесь $\Pi = \Pi_{(p)} + \Pi_{(e)}$ (индекс p относится к протонам, e — к электронам).

33. 3. Вычислим поляризационный оператор

$$\Pi(\vec{k}, \omega_n) = \frac{-g}{\beta_0} \int d^3 p \sum_n G_0(\vec{p}, \varepsilon_n) G_0(\vec{p} + \vec{k}, \varepsilon_n + \omega_n).$$

Подставляя сюда выражение (31. 27), без труда находим интеграл по трехмерному импульсу. Что же касается суммирования по частотам, рассматриваемую сумму удобно свести к контурному интегралу, вводя функцию $\text{tg} \left(\frac{\omega \beta_0}{2} \right)$, имеющую полюса в тех точках, по которым проводится суммирование (рис. 68). Тогда можно написать (ε_i — полюса функции f)

$$\frac{1}{\beta_0} \sum_n f(\varepsilon_n) = -\frac{1}{2} \sum_i \text{выч } f(\varepsilon) |_{\varepsilon_i} \text{tg } \frac{\varepsilon_i \beta_0}{2}.$$

Несложное вычисление дает следующее выражение для поляризационного оператора:

$$\Pi(\vec{k}, \omega_n) = -\frac{g}{M} \int d^3 p n_p \frac{p^2 - (\vec{p} + \vec{k})^2}{\left[\frac{p^2 - (\vec{p} + \vec{k})^2}{2M} \right]^2 + \omega_n^2}. \quad (33.10)$$

При малых значениях \vec{k} и $\omega/k \rightarrow 0$ имеем

$$\Pi(0) = \Pi_{(e)}(0) + \Pi_{(p)}(0) = -\beta [\varrho_{(e)} + \varrho_{(p)}]. \quad (33.11)$$

В соответствии с результатами § 27 это приводит к дебаевскому экранированию кулоновского потенциала. Соответствующий радиус R_0 просто связан с поляризационным оператором

$$\kappa^2 \equiv \frac{1}{R_0^2} = -4\pi e^2 \Pi(0). \quad (33.12)$$

Представляя соотношение (33. 5) в виде

$$\gamma(\vec{k}, \omega_n) = \frac{4\pi e^2}{k^2} \left[1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \Pi(\vec{k}, \omega_n) \right]^{-1},$$

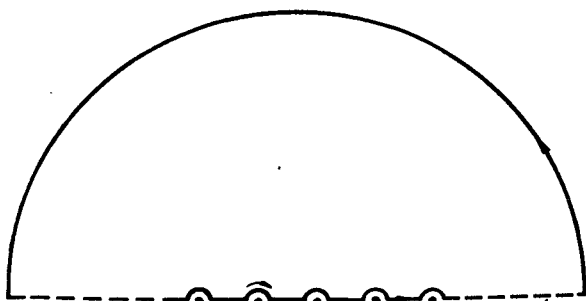


Рис. 68

находим, что в точке

$$\omega^2 = 4\pi \left[\frac{\varrho_{(p)}}{M_{(p)}} + \frac{\varrho_{(e)}}{M_{(e)}} \right] e^2 \quad (k \rightarrow 0) \quad (33.13)$$

эффективный потенциал γ имеет полюс. Это свидетельствует о наличии новой ветви спектра возбуждений парного типа — плазменных волн (см. § 27 и 28).

Переходя к вычислению корреляционной части термодинамического потенциала, подставим в соотношение (33. 9) выражения (33. 10). Несложное вычисление, аналогичное проведенному выше, дает

$$\Omega - \Omega_0 = -\frac{2}{3} \sqrt{\pi} \beta e^3 (\varrho_{(p)} + \varrho_{(e)})^{3/2}. \quad (33.14)$$

Это выражение получается и с помощью метода Дебая—Хюккеля. Относительный вклад корреляционного члена в Ω имеет порядок $\alpha^{3/2}$. Неаналитический характер этой величины, как функции α , делает невозможным использование в данном случае нескольких первых членов ряда теории возмущений. Суммирование целой последовательности таких членов обязательно.

В работе [131] были вычислены и последующие члены разложения Ω , имеющие порядок $\alpha^2 \ln \alpha$. Мы ограничимся приведением соответствующих выражений при $kT < e^2/a_0$

$$\begin{aligned} \Omega - \Omega_0 &= -\frac{2}{3} V \sqrt{\pi \beta} e^3 (Z^2 \varrho_{(i)} + \varrho_{(e)})^{3/2} + \\ &+ \frac{\pi}{3} \beta^2 e^6 (Z^2 \varrho_{(i)} - \varrho_{(e)})^2 \ln (1/\beta e^2 R_0) + O(\alpha^2) \end{aligned} \quad (33.15)$$

и при $kT \gg Z^2 e^2/a_0$

$$\begin{aligned} F - F_0 &= -\frac{2}{3} V \sqrt{\pi \beta} e^3 [Z(Z+1)]^{3/2} \varrho^{3/2} + \\ &+ \frac{\pi}{3} Z^2 (Z^2 - 1) \beta^2 e^6 \varrho^2 \ln \left(\frac{m^{1/2}}{\beta^{1/2} \kappa} \right) + O(\alpha^2). \end{aligned} \quad (33.16)$$

Здесь Ω и F — термодинамический потенциал и свободная энергия соответственно, $\varrho_{(i)}$ — плотность ионов, $\varrho_{(e)}$ — плотность электронов.

ПРИЛОЖЕНИЯ

А. ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ ОПЕРАТОРОВ

А. 1. В представлении чисел заполнения сильно облегчается задача вычисления средних значений операторов по состоянию Ψ_0 , отвечающему одночастичному приближению. В отличие от конфигурационного представления, где для решения этой задачи пришлось бы проводить громоздкие вычисления с детерминантами Слейтера — Фока, в представлении чисел заполнения все сводится к использованию простых правил перестановки операторов рождения и уничтожения.

Начнем с рассмотрения n -частичной матрицы плотности, определяемой соотношением

$$R(q_1 \dots q_n, q'_1 \dots q'_n) = \langle \Psi_0 | \Psi^+(q'_n) \dots \Psi^+(q'_1) \times \\ \times \Psi(q_1) \dots \Psi(q_n) | \Psi_0 \rangle. \quad (A. 1)$$

Подставляя сюда разложения (3. 9), получим

$$R = \sum_{\mu, \nu} \chi_{\mu_1}^*(q'_1) \dots \chi_{\mu_n}^*(q'_n) \chi_{\nu_1}(q_1) \dots \chi_{\nu_n}(q_n) A_{\mu_1 \dots \mu_n, \nu_1 \dots \nu_n},$$

где

$$A_{\mu_1 \dots \mu_n, \nu_1 \dots \nu_n} = \langle \Psi_0 | A_{\mu_n}^+ \dots A_{\mu_1}^+ A_{\nu_1} \dots A_{\nu_n} | \Psi_0 \rangle. \quad (A. 2)$$

При вычислении $A_{\mu\nu}$ следует иметь в виду, что вследствие совпадения правой и левой обкладок этого выражения состояния уничтожаемых частиц ($\nu_1 \dots \nu_n$) должны совпадать в совокупности с состояниями рождающихся частиц ($\mu_1 \dots \mu_n$). Кроме того, поскольку состояние Ψ_0 отвечает одночастичному приближению и удовлетворяет условию (4. 6), возникающие под знаком среднего операторы чисел заполнения n_{ν} можно заменить их собственными значениями n_{ν} .

Вычислим несколько простейших функций $A_{\mu\nu}$. При $n = 1$ имеем

$$A_{\mu\nu} = \langle \Psi_0 | n_{\nu} | \Psi_0 \rangle \delta_{\mu\nu} = n_{\mu} \delta_{\mu\nu}. \quad (A. 3)$$

При $n = 2$, учитывая две возможности ($\mu_1 = \nu_1, \mu_2 = \nu_2$ и $\mu_1 = \nu_2, \mu_2 = \nu_1$) и переставляя в каждом случае операторы A и A^+ таким образом, чтобы возникли соответствующие операторы чисел заполнения, найдем

$$A_{\mu_1 \mu_2, \nu_1 \nu_2} = n_{\nu_1} n_{\nu_2} (\delta_{\mu_1 \nu_1} \delta_{\mu_2 \nu_2} - \delta_{\mu_1 \nu_2} \delta_{\mu_2 \nu_1}).$$

В общем случае, как можно показать по индукции, имеет место соотношение

$$A_{\mu_1 \dots \mu_n, \nu_1 \dots \nu_n} = n_{\nu_1} \dots n_{\nu_n} \det | \delta_{\mu_i \nu_k} |, \quad (A. 4)$$

где \det — детерминант, построенный из δ -символов ($i, k = 1, 2, \dots, n$).

Возвращаясь к выражению для матрицы плотности, можно с помощью выражения (A. 2) записать для $n = 1$

$$R(q_1, q'_1) = \sum_{\nu} n_{\nu} \chi_{\nu}^*(q'_1) \chi_{\nu}(q_1), \quad (A. 5)$$

для $n = 2$

$$R(q_1, q_2, q'_1, q'_2) = R(q_1, q'_1) R(q_2, q'_2) - R(q_1, q'_2) R(q_2, q'_1). \quad (\text{A. 6})$$

В общем случае n -частичная матрица плотности представляется в виде детерминанта, построенного из одночастичных матриц,

$$R(q_1 \dots q_n, q'_1 \dots q'_n) = \det | R(q_i, q'_k) |. \quad (\text{A. 7})$$

Возможность сведения матрицы плотности высшего порядка к одночастичным целиком обусловлена выбором одночастичного приближения.

Выражение для матрицы плотности высшего порядка можно привести к виду простого произведения одночастичных матриц плотности путем введения операторов перестановки координат \mathcal{P} (см. § 1). Для двухчастичной матрицы плотности получается выражение

$$R(q_1, q_2, q'_1, q'_2) = (1 - \mathcal{P}_{1,2}) R(q_1, q'_1) R(q_2, q'_2), \quad (\text{A. 8})$$

где индексы у оператора \mathcal{P} обозначают переставляемые координаты (\mathcal{P} действует только на координаты без штрихов). Для $n = 3$ нетрудно найти

$$\begin{aligned} R(q_1, q_2, q_3, q'_1, q'_2, q'_3) = \\ = (1 - \mathcal{P}_{1,2}) (1 - \mathcal{P}_{1,3} - \mathcal{P}_{2,3}) R(q_1, q'_1) R(q_2, q'_2) R(q_3, q'_3). \end{aligned} \quad (\text{A. 9})$$

Аналогичным образом можно представить матрицы плотности высшего порядка.

А. 2. Переходим к задаче о вычислении средних значений операторов по состоянию Ψ_0 . Среднее значение n -частичного оператора α_n в представлении чисел заполнения имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \alpha_n | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{n!} \int dq_1 \dots dq_n \langle \Psi_0 | \Psi^+(q_n) \dots \Psi^+(q_1) \times \\ \times \mathbf{a}_{q_1} \dots \mathbf{a}_{q_n} \Psi(q_1) \dots \Psi(q_n) | \Psi_0 \rangle, \end{aligned}$$

где индексы у оператора \mathbf{a} обозначают переменные, на которые он действует. Этот оператор можно вынести из-под знака среднего и свести тем самым рассматриваемое выражение к матрице плотности. Для этого используем тождество

$$\begin{aligned} b(q_1 \dots q_n) \mathbf{a}_{q_1} \dots \mathbf{a}_{q_n} = \\ = \int dq'_1 \dots dq'_n \delta(q_1 - q'_1) \dots \delta(q_n - q'_n) \mathbf{a}_{q_1} \dots \mathbf{a}_{q_n} b(q'_1 \dots q'_n), \end{aligned}$$

позволяющее поменять местами операторы поля и \mathbf{a} . Отсюда

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \alpha_n | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{n!} \int dq_1 \dots dq_n dq'_1 \dots dq'_n \times \\ \times \delta(q_1 - q'_1) \dots \delta(q_n - q'_n) \mathbf{a}_{q_1} \dots \mathbf{a}_{q_n} R(q_1 \dots q_n, q'_1 \dots q'_n). \end{aligned} \quad (\text{A. 10})$$

В частности, можно написать

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \int dq_1 dq'_1 \delta(q_1 - q'_1) \mathbf{a}_{q_1} R(q_1, q'_1) = \\ = \int dq_1 \lim_{q'_1 \rightarrow q_1} \mathbf{a}_{q_1} R(q_1, q'_1). \end{aligned} \quad (\text{A. 11})$$

Иными словами, следует сначала подействовать оператором на матрицу плотности и лишь потом положить $q'_1 = q_1$. Для двухчастичного оператора имеем

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \alpha_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \int dq_1 dq_2 \lim_{q_{1,2} \rightarrow q_{1,2}} \mathbf{a}_{q_1 q_2} \times \\ \times (1 - \mathcal{P}_{12}) R(q_1, q'_1) R(q_2, q'_2). \end{aligned} \quad (\text{A. 11}')$$

Введем оператор заполнения \mathbf{q} , определяемый условием

$$R(q, q') = \mathbf{q} \delta(q - q').$$

Тогда выражение (А. 11) можно переписать в виде

$$\langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \int dq_1 dq'_1 \delta(q_1 - q'_1) \mathbf{a}_{q_1} \mathbf{q}_{q_1} \delta(q_1 - q'_1).$$

Но $\delta(q_1 - q'_1)$ представляет собой волновую функцию в координатном представлении состояния с определенным значением координаты, равным q'_1 . Поэтому выражение $\int dq_1 \delta(q_1 - q'_1) \mathbf{a} \mathbf{q} \delta(q_1 - q'_1)$ является диагональным матричным элементом оператора $\mathbf{a} \mathbf{q}$, а последующее интегрирование по q'_1 дает сумму таких матричных элементов, т. е. шпур* оператора $\mathbf{a} \mathbf{q}$

$$\langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \text{Sp}(\mathbf{a} \mathbf{q}). \quad (\text{А. 12})$$

Аналогично

$$\langle \Psi_0 | \alpha_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \text{Sp}[\mathbf{a}_{q_1 q_2} (1 - \mathcal{F}_{1, 2}) \mathbf{q}_{q_1} \mathbf{q}_{q_2}] \quad (\text{А. 13})$$

и т. д.

А. 3. Используя свойство независимости шпура от выбора системы функций, приведем выражения (А. 12) и (А. 13) к виду, удобному для приложений.

Выберем в качестве системы функций индивидуальные волновые функции частиц. На основе соотношения (4. 9) и определения матричных элементов можно написать

$$\langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \sum_{\nu} n_{\nu} \langle \nu | \alpha_1 | \nu \rangle, \quad (\text{А. 14})$$

$$\langle \Psi_0 | \alpha_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mu \nu} n_{\mu} n_{\nu} \langle \mu \nu | \alpha_2 (1 - \mathcal{F}_{1, 2}) | \mu \nu \rangle \quad (\text{А. 15})$$

и т. д.; учитывая, что перестановка аргументов в обкладках последнего матричного элемента равносильна перестановке индексов состояния, имеем

$$\langle \mu \nu | \alpha_2 (1 - \mathcal{F}) | \mu \nu \rangle = \langle \mu \nu | \alpha_2 | \mu \nu \rangle - \langle \mu \nu | \alpha_2 | \nu \mu \rangle.$$

Другая возможность написания средних значений связана с использованием системы плоских воли [см. выражение (4. 20)]. При этом

$$\langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \text{Sp}_{\sigma \tau} \int d\vec{x} \int d^3 p \langle \alpha_1 \mathbf{q} \rangle_p, \quad (\text{А. 16})$$

где шпур берется по дискретным индексам, а символ $\langle \dots \rangle_p$ означает

$$\langle \dots \rangle_p = \exp(-i\vec{p}\vec{x}) (\dots) \exp(i\vec{p}\vec{x}).$$

Если α_1 не зависит от оператора импульса, то с учетом выражения (4. 18) можно написать

$$\langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \text{Sp}_{\sigma \tau} \int d\vec{x} \int d^3 p \alpha_1 f(\vec{x}, \vec{p}).$$

В общем случае, полагая $\alpha_1 = \alpha_1(\vec{x}, \nabla_x)$, имеем

$$\langle \alpha_1 \mathbf{q} \rangle_p = \exp(-i\vec{p}\vec{x}) \alpha_1(\vec{x}, \nabla_x) \exp(i\vec{p}\vec{x}) f(\vec{x}, \vec{p}),$$

откуда**

$$\langle \Psi_0 | \alpha_1 | \Psi_0 \rangle = \text{Sp}_{\sigma \tau} \int d\vec{x} \int d^3 p \alpha_1(\vec{x}, \nabla_x + i\vec{p}) f(\vec{x}, \vec{p}), \quad (\text{А. 16}')$$

* Напомним основные свойства шпура операторов. Во-первых, его величина не зависит от выбора системы функций, используемых при его вычислении. Во-вторых, под знаком шпура допустима циклическая перестановка операторов-сомножителей.

** Здесь мы фактически воспользовались теоремой Лейбница о дифференцировании произведения

$$f(\nabla) a(x) b(x) = f(\nabla_a + \nabla_b) a(x) b(x),$$

где ∇_a, b действует соответственно на $a(x)$ и $b(x)$.

где ∇_x действует на функцию распределения. Если, в частности, \mathbf{a}_1 не зависит от \vec{x} , то в этом соотношении можно заменить $\nabla_x + \vec{i}\rho$ на $\vec{i}\rho$ (это легко проверить интегрированием по частям).

Соответствующее выражение для двухчастичного среднего мы приведем для случая, когда оператор \mathbf{a}_2 зависит от импульсов лишь в комбинации $(\nabla_{x_1} - \nabla_{x_2})/2$.

$$\langle \Psi_0 | \mathbf{a}_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \text{Sp}_{\sigma_1 \tau_1, \sigma_2 \tau_2} \times \\ \times \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 \exp \left[-i (\vec{p}_1 \vec{x}_1 + \vec{p}_2 \vec{x}_2) \right] \mathbf{a}_2 \mathbf{e}_{q_1} \mathbf{e}_{q_2} \times \\ \times \left\{ \exp \left[i (\vec{p}_1 \vec{x}_1 + \vec{p}_2 \vec{x}_2) \right] - \mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{F}^{(\tau)} \exp \left[i (\vec{p}_1 \vec{x}_2 + \vec{p}_2 \vec{x}_1) \right] \right\}$$

или

$$\langle \Psi_0 | \mathbf{a}_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \text{Sp}_{\sigma_1 \tau_1, \sigma_2 \tau_2} \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 \times \\ \times \left\{ 1 - \mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{F}^{(\tau)} \exp \left[i (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \right] \right\} \times \\ \times \mathbf{a}_2 \left(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \frac{i (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) + \nabla_{x_1} - \nabla_{x_2}}{2} \right) f(\vec{x}_1, \vec{p}_1) f(\vec{x}_2, \vec{p}_2). \quad (\text{A. 17})$$

Если \mathbf{a}_2 является просто функцией \vec{x}_1, \vec{x}_2 , то

$$\langle \Psi_0 | \mathbf{a}_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 \times \\ \times \left\{ g^2 - g \exp \left[i (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \right] \right\} \times \\ \times \mathbf{a}_2 (\vec{x}_1, \vec{x}_2) f(\vec{x}_1, \vec{p}_1) f(\vec{x}_2, \vec{p}_2), \quad (\text{A. 17}')$$

где $g = \text{Sp}_{\sigma\tau} (1) -$ фактор вырождения.

Наконец, если в качестве системы функций возьмем функции с определенным значением координаты $\delta(q - q')$, мы вернемся к соотношениям (A. 11), (A. 11').

Приходится сталкиваться также со шпуром двухчастичного оператора, который берется лишь по одному из наборов переменных

$$\mathbf{S} = \text{Sp}_{q_2} [\mathbf{a}_2 (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathbf{e}_{q_2}] = \\ = \int dq_2 dq'_2 \delta(q_2 - q'_2) \mathbf{a}_2 (1 - \mathcal{F}_{1,2}) R(q_2, q'_2). \quad \text{[(A. 18)]}$$

Используя выражение (A. 5), можно написать

$$\mathbf{S} = \sum_{\nu} n_{\nu} \int dq_2 \chi_{\nu}^*(q_2) \mathbf{a}_2 (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \chi_{\nu}(q_2).$$

Результат действия этого оператора на функцию χ_{μ} имеет вид

$$\mathbf{S} \chi_{\mu}(q_1) = \sum_{\nu} n_{\nu} \int dq_2 \chi_{\nu}^*(q_2) \times \\ \times \mathbf{a}_2 \times \{ \chi_{\nu}(q_2) \chi_{\mu}(q_1) - \chi_{\nu}(q_1) \chi_{\mu}(q_2) \}. \quad (\text{A. 19})$$

Запишем оператор \mathbf{S} через функцию распределения, сохраняя прежние предположения о структуре оператора \mathbf{a}_2 . Поскольку \mathbf{S} может зависеть от оператора импульса, рассмотрим результат его действия на $\exp(i\vec{p}_1 \vec{x}_1)$:

$$\mathbf{S} \exp(i\vec{p}_1 \vec{x}_1) = \text{Sp}_{\sigma_2 \tau_2} \int d\vec{x}_2 \int d^3 p_2 \exp(-i\vec{p}_2 \vec{x}_2) \times \\ \times \mathbf{a}_2 (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathbf{e}_{q_2} \exp \left[i (\vec{p}_1 \vec{x}_1 + \vec{p}_2 \vec{x}_2) \right].$$

Проводя такие же выкладки, как и при вычислении среднего, находим

$$\begin{aligned} S \exp(i\vec{p}_1 \vec{x}_1) &= \text{Sp}_{\sigma_2 \tau_2} \int d\vec{x}_2 \int d^3 p_2 \times \\ &\times \left\{ \mathbf{a}_2 \left[\vec{x}_1, \vec{x}_2, -\frac{1}{2} (\nabla_{x_2} + i\vec{p}_2) \right] f(\vec{x}_2, \vec{p}_1 + \vec{p}_2) - \mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{F}^{(\tau)} \times \right. \\ &\times \exp[i\vec{p}_2 (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)] \mathbf{a}_2 \left[\vec{x}_1, \vec{x}_2, \frac{1}{2} (\nabla_{x_1} + i\vec{p}_2) \right] f(\vec{x}_1, \vec{p}_1 + \vec{p}_2) \left. \right\} \exp(i\vec{p}_1 \vec{x}_1). \end{aligned}$$

Окончательно в символической форме, заменяя \vec{p}_1 на оператор импульса \vec{p} , можно записать

$$\begin{aligned} S &= \text{Sp}_{\sigma_2 \tau_2} \int d\vec{x}_2 \int d^3 p_2 \left\{ \mathbf{a}_2 \left[\vec{x}_1, \vec{x}_2, -\frac{1}{2} (\nabla_{x_2} + i\vec{p}_2) \right] f(\vec{x}_2, \vec{p}_2 + \vec{p}) - \right. \\ &- \left. \mathcal{F}^{(\sigma)} \mathcal{F}^{(\tau)} \exp[i\vec{p}_2 (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)] \mathbf{a}_2 \left[\vec{x}_1, \vec{x}_2, \frac{1}{2} (\nabla_{x_1} + i\vec{p}_2) \right] f(\vec{x}_1, \vec{p}_2 + \vec{p}) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A. 20})$$

А. 4. Несколько более сложную задачу представляет собой вычисление среднего значения произведения операторов. Рассмотрим простейшие примеры такого рода.

Произведение операторов $\mathbf{a}\mathbf{b}$ всегда можно представить в виде полусуммы их коммутатора $[\mathbf{a}, \mathbf{b}]$ и антикоммутатора $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\}$. Начнем с вычисления среднего значения коммутатора. Коммутатор двух одночастичных операторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{b}_1 , как нетрудно проверить с помощью правил коммутации (3. 10), представляет собой также одночастичный оператор

$$[\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] = \int dq \Psi^+(q) [\mathbf{a}, \mathbf{b}] \Psi(q).$$

Отсюда с помощью выражения (А. 12) находим

$$\langle \Psi_0 | [\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] | \Psi_0 \rangle = \text{Sp}([\mathbf{a}, \mathbf{b}] \mathbf{q}). \quad (\text{A. 21})$$

Используя возможность циклической перестановки сомножителей под знаком шпура, можно переписать их в виде $\mathbf{a}\mathbf{b}\mathbf{q} - \mathbf{a}\mathbf{q}\mathbf{b} = \mathbf{a}[\mathbf{b}, \mathbf{q}]$. Поэтому, если один из операторов коммутирует с \mathbf{q} , т. е. если отвечающая ему величина является интегралом движения, то соответствующее среднее значение обращается в нуль.

Аналогично коммутатор одно- и двухчастичного операторов представляет собой двухчастичный оператор следующего вида:

$$[\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_2] = \int dq_1 dq_2 \Psi^+(q_1) \Psi^+(q_2) [\mathbf{a}_{q_1}, \mathbf{b}_{q_1 q_2}] \Psi(q_2) \Psi(q_1),$$

откуда

$$\langle \Psi_0 | [\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_2] | \Psi_0 \rangle = \text{Sp} \{ [\mathbf{a}_{q_1}, \mathbf{b}_{q_1 q_2}] (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathbf{q}_{q_1} \mathbf{q}_{q_2} \}. \quad (\text{A. 22})$$

А. 5. Переходим к нахождению среднего значения антикоммутатора двух операторов. Рассмотрим сначала антикоммутатор двух одночастичных операторов

$$\langle \Psi_0 | \{\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1\} | \Psi_0 \rangle = \int dq_1 dq_2 \langle \Psi_0 | \{ \Psi^+(q_1) \mathbf{a} \Psi(q_1), \Psi^+(q_2) \mathbf{b} \Psi(q_2) \} | \Psi_0 \rangle.$$

Вводя δ -функции, приводим это выражение к виду

$$\begin{aligned} &\int dq_1 dq_2 dq'_1 dq'_2 \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) (\mathbf{a}_{q_1} \mathbf{b}_{q_2} + \mathbf{a}_{q_2} \mathbf{b}_{q_1}) \times \\ &\times \langle \Psi_0 | \Psi^+(q'_1) \Psi(q_1) \Psi^+(q'_2) \Psi(q_2) | \Psi_0 \rangle. \end{aligned}$$

Фигурирующее здесь среднее значение может быть сведено к матрицам плотности. Для этого поменяем местами второй и третий операторы, используя правила перестановки (3. 10). В результате среднее значение приобретает вид

$$\begin{aligned} &R(q_1, q_2, q'_1, q'_2) + \delta(q_1 - q'_2) R(q_1, q'_2) = \\ &= [(1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathbf{q}_{q_1} \mathbf{q}_{q_2} + \mathcal{F}_{1,2} \mathbf{q}_{q_1}^2] \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_1 - q'_2). \end{aligned}$$

Во втором слагаемом квадратной скобки введен оператор перестановки, с помощью которого δ -функции приобретают тот же вид, что и в предыдущем выражении. Кроме того, использовано соотношение $\mathbf{e}^2 = \mathbf{e}$.

Рассуждая далее так же, как в разделе А. 2, находим после соответствующей симметризации по q_1, q_2

$$\langle \Psi_0 | \{ \alpha_1, \beta_1 \} | \Psi_0 \rangle = 2\text{Sp}(\mathbf{a}\mathbf{e}) \text{Sp}(\mathbf{b}\mathbf{e}) + \text{Sp} [\mathbf{a}_{q_1} \mathbf{b}_{q_2} (\mathbf{e}_{q_1} - \mathbf{e}_{q_2})^2 \mathcal{F}_{1,2}]. \quad (\text{A. 23})$$

В заключение вычислим среднее от антикоммулятора одно- и двухчастичного операторов. Имеем

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \{ \alpha_2, \beta_1 \} | \Psi_0 \rangle &= \frac{1}{2} \int dq_1 dq_2 dq_3 dq'_1 dq'_2 dq'_3 \delta(q_1 - q'_1) \times \\ &\times \delta(q_2 - q'_2) \delta(q_3 - q'_3) \mathbf{a}_{q_1 q_2} \mathbf{b}_{q_3} (S_1 + S_2). \end{aligned}$$

Входящее сюда выражение

$$S_1 = \langle \Psi_0 | \Psi^+(q'_2) \Psi^+(q'_1) \Psi(q_1) \Psi(q_2) \Psi^+(q'_3) \Psi(q_3) | \Psi_0 \rangle$$

путем перестановки оператора $\Psi^+(q'_3)$ иалево может быть сведено к матрицам плотности

$$\begin{aligned} S_1 &= [\mathcal{F}_{2,3} \delta(q_3 - q'_3) + \mathcal{F}_{1,3} \delta(q_3 - q'_3)] R(q_1, q_2, q'_1, q'_2) + \\ &+ R(q_1, q_2, q_3, q'_1, q'_2, q'_3). \end{aligned}$$

Аналогично

$$\begin{aligned} S_2 &= \langle \Psi_0 | \Psi^+(q'_3) \Psi(q_3) \Psi^+(q'_2) \Psi^+(q'_1) \Psi(q_1) \Psi(q_2) | \Psi_0 \rangle = \\ &= [\mathcal{F}_{2,3} \delta(q_2 - q'_2) R(q_1, q_3, q'_1, q'_3) + \mathcal{F}_{3,1} \delta(q_1 - q'_1) R(q_2, q_3, q'_2, q'_3)] + \\ &+ R(q_1, q_2, q_3, q'_1, q'_2, q'_3). \end{aligned}$$

Переходя к шпуру, получаем

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \{ \alpha_2, \beta_1 \} | \Psi_0 \rangle &= \frac{1}{2} \text{Sp} \{ \mathbf{a}_{q_1 q_2} \mathbf{b}_{q_3} [2((1 - \mathcal{F}_{1,2})(1 - \mathcal{F}_{2,3}) - \mathcal{F}_{1,3}) \times \\ &\times \mathbf{e}_{q_1} \mathbf{e}_{q_2} \mathbf{e}_{q_3} (\mathcal{F}_{2,3} + \mathcal{F}_{1,3})(1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathbf{e}_{q_1}^2 \mathbf{e}_{q_2} + \mathcal{F}_{2,3}(1 - \mathcal{F}_{1,3}) \times \\ &\times \mathbf{e}_{q_1}^2 \mathbf{e}_{q_3} + \mathcal{F}_{1,3}(1 - \mathcal{F}_{2,3}) \mathbf{e}_{q_3}^2 \mathbf{e}_{q_2}] \}. \end{aligned}$$

Заменяя в последних двух слагаемых

$$\mathcal{F}_{2,3}(1 - \mathcal{F}_{1,3}) \rightarrow (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathcal{F}_{2,3}, \quad \mathcal{F}_{1,3}(1 - \mathcal{F}_{2,3}) \rightarrow (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathcal{F}_{1,3},$$

получим окончательно

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \{ \alpha_2, \beta_1 \} | \Psi_0 \rangle &= \text{Sp} [\mathbf{a}_2 (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathbf{e}_{q_1} \mathbf{e}_{q_2}] \text{Sp}(\mathbf{b}\mathbf{e}) + \\ &+ \text{Sp} [\mathbf{a}_{q_1 q_2} \mathbf{b}_{q_3} (1 - \mathcal{F}_{1,2}) \mathbf{e}_{q_2} (\mathbf{e}_{q_1} - \mathbf{e}_{q_3})^2 \mathcal{F}_{1,3}]. \quad (\text{A. 24}) \end{aligned}$$

Как видно из соотношений (А. 21) — (А. 24), среднее от произведения операторов отнюдь не равно соответствующему произведению средних. Дополнительные члены отвечают наличию так называемой обменной (или статистической) корреляции между частицами, обусловленной антисимметрией волновых функций, т. е. принципом Паули.

Б. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ ОПЕРАТОРНОГО ИСЧИСЛЕНИЯ

Б. 1. На всем протяжении развития квантовой теории проявлялась тенденция к явному операторному представлению величин, входящих в аппарат теории. В качестве примеров можно назвать общие исследования статистической суммы в квантовой статистике [132], теорию рассеяния Липпмана — Швингера [133], теорию S-матрицы [134], статистическую теорию многих частиц.

Причиной перехода к операторной формулировке является, с одной стороны, стремление к простоте и компактности, которыми отличаются операторные выражения. С другой стороны, эти выражения описывают соответствующую физическую величину в наиболее «чистом», инвариантном относительно изменения типа представления виде. Наконец, операторная формулировка явным образом отражает тот факт, что основным различием между классическим и квантовым способами описания объекта является операторный характер квантового подхода. Операторная формулировка наглядно отражает соотношения неопределенностей; проблема перехода к классике (или квазиклассике) при этом заметно упрощается и ее решение сводится к пренебрежению коммутаторами соответствующих операторов.

Простота операторной формулировки в значительной степени компенсируется тем, что операторные выражения относятся к классу величин математически более сложной природы, чем обычные величины. Как правило, операторные выражения представляют собой функции нескольких некоммутирующих друг с другом аргументов. Правила обращения с такими функциями весьма сложны. Они будут рассмотрены в этом параграфе. Мы будем следовать простому и физически легко интерпретируемому методу, предложенному в работе Блоха [135]. Что же касается других методов операторного исчисления, то их краткий обзор и библиография содержатся в работе [43].

Б. 2. В дальнейшем будем рассматривать функции от суммы операторов.

Пусть дана некоторая функция $f(a + b)$ от суммы двух некоммутирующих аргументов a и b . По определению, два оператора A и B считаются функционально связанными $[A = f(B)]$, если их собственные функции совпадают, а собственные значения имеют ту же функциональную связь, что и операторы

$$B\psi_n = B_n\psi_n, \quad A\psi_n = f(B_n)\psi_n.$$

Функция некоммутирующих аргументов является гораздо более сложным математическим образованием, чем обычная функция. Это проявляется в том, что при вычислениях, где фигурируют подобные функции, элементарные математические правила оказываются совершенно непригодными. Так, например $(a + b)^2$ и $\exp(a + b)$ отнюдь не равны соответственно $a^2 + 2ab + b^2$ и $\exp(a)\exp(b)$, а зависят и весьма сложным образом от коммутаторов операторов a и b .

Поэтому целью операторного исчисления является переформулирование указанных правил, сводящееся к выявлению соответствующей зависимости от коммутаторов.

При достаточно широких предположениях о виде функции можно считать возможным ее разложение в интеграл Фурье (или Лапласа)

$$f(a + b) = \int d\tau f_\tau \exp[\tau(a + b)], \quad (\text{Б. 1})$$

где τ — мнимый или действительный параметр. Это позволяет ограничиться рассмотрением только экспоненциальной функции

$$E(\tau) = \exp[\tau(a + b)].$$

Если бы операторы a и b коммутировали, то мы имели бы просто $E(\tau) = \exp(\tau b)\exp(\tau a)$. Дополнительную зависимость от коммутаторов можно отразить, введя в эту формулу добавочный сомножитель K

$$E(\tau) = \exp(\tau b) K(\tau) \exp(\tau a). \quad (\text{Б. 2})$$

Как правило, в произведении операторов каждый из сомножителей действует на все величины, стоящие справа от него.

Порядок сомножителей в выражении (Б. 2) может быть произвольным (конечно, при разном выборе будут получаться и разные выражения для K). Принятое написание оказывается удобным в том случае, когда объектом действия $f(a + b)$ является ψ_a — собственная функция оператора a с собственным значением a . При этом

$$E(\tau)\psi_a = \exp(\tau b) K(\tau) \exp(\tau a)\psi_a = \exp[\tau(a + b)] K(\tau)\psi_a.$$

Теперь в показателе экспоненты стоят коммутирующие величины и все отличие от обычной экспоненты сосредоточено в множителе K . В дальнейшем для краткости не будем писать функции Ψ_a , на которую действует рассматриваемый оператор.

Перейдем к отысканию уравнения для $K(\tau)$. Дифференцируя выражение (Б. 2) по τ , получим

$$\frac{\partial K}{\partial \tau} = \exp(-\tau b) a \exp(\tau b) K - K a. \quad (\text{Б. 3})$$

Отметим, что комбинация

$$\exp(-\tau b) a \exp(\tau b) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\tau)^n}{n!} \left[\overbrace{b [b \dots [b, a] \dots]}^n \right]$$

выражается только через коммутаторы a и b , что легко проверить разложением в ряд по τ .

Полагая в выражении (Б. 2) $\tau = 0$, приходим к начальному условию для $K(\tau)$

$$K(0) = 1.$$

Б. 3. Если операторы a и b таковы, что большинство их коммутаторов равно нулю, то уравнение (Б. 3) может иметь простые решения.

1. Пусть, например, коммутатор $[a, b]$ является c -числом; это будет единственный отличный от нуля коммутатор. Тогда

$$\exp(-\tau b) a \exp(\tau b) = a - \tau [b, a],$$

и мы получаем известную формулу Глаубера [136]

$$E(\tau) = \exp[\tau(a+b)] \exp\left\{-\frac{\tau^2}{2} [b, a]\right\}. \quad (\text{Б. 4})$$

Более сложному случаю, когда c -числами являются коммутаторы $[b[b, a]]$ и $[[b, a] a]$, отвечает формула

$$E(\tau) = \exp[\tau(a+b)] \exp\left\{-\frac{\tau^2}{2} [b, a]\right\} \times \\ \times \exp\left\{\frac{\tau^3}{6} \left\{ [b[b, a]] + [[b, a] a] \right\}\right\}.$$

Подобным же образом из $E(\tau)$ могут быть выделены множители, отвечающие коммутаторам высшего порядка.

2. Пусть отличны от нуля только коммутаторы типа $[b[b \dots [b, a] \dots]]$, т. е. они все коммутируют друг с другом и с a . При этом K также коммутирует с a и уравнение для K легко решается

$$E(\tau) = \exp(\tau b) \exp\left\{\int_0^{\tau} dt \exp(-tb) a \exp(tb)\right\}. \quad (\text{Б. 5})$$

Например, если $a = F(x)$ и $b = \frac{\partial}{\partial x}$, то, учитывая свойства оператора смещения*, получим

$$\exp\left\{\tau \left[\frac{\partial}{\partial x} + F(x)\right]\right\} = \exp\left(\tau \frac{\partial}{\partial x}\right) \exp\left[\int_{x-\tau}^x F(\xi) d\xi\right] = \\ = \exp\left[\int_x^{x+\tau} F(\xi) d\xi\right] \exp\left(\tau \frac{\partial}{\partial x}\right). \quad (\text{Б. 6})$$

* Оператором смещения является величина $\exp(a\nabla)$

$$\exp(a\nabla) \varphi(x) = \varphi(x+a).$$

Другой частный случай отвечает коммутационным соотношениям

$$[\mathbf{b}, \mathbf{a}] = \lambda \mathbf{a},$$

где λ — с-число.

При этом

$$E(\tau) = \exp(\tau \mathbf{b}) \exp \left[\frac{1 - \exp(-\tau \lambda)}{\lambda} \mathbf{a} \right]. \quad (\text{Б. 7})$$

3. Более сложен случай, когда отличны от нуля (и коммутируют друг с другом) коммутаторы типа $[\mathbf{a} [\mathbf{a} \dots [\mathbf{a}, \mathbf{b}] \dots]]$.

Тогда

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \tau} = [\mathbf{a}, \mathbf{K}] + \tau [\mathbf{a}, \mathbf{b}] \mathbf{K}.$$

Полагая $\mathbf{K} = \exp(\alpha \tau) \mathbf{L} \exp(-\alpha \tau)$, найдем

$$\mathbf{L} = \exp \left\{ \int_0^\tau dt t \exp(-\alpha t) [\mathbf{a}, \mathbf{b}] \exp(\alpha t) \right\}.$$

В частности, при $[\mathbf{a}\mathbf{b}] = \lambda \mathbf{b}$ получаем

$$\mathbf{L} = \exp \left\{ \frac{1 - \exp(-\lambda \tau) (1 + \lambda \tau)}{\lambda} \mathbf{b} \right\}.$$

Учитывая соотношение $\exp(\alpha \tau) f(\mathbf{b}) \exp(-\alpha \tau) = f(\exp(\lambda \tau) \mathbf{b})$, легко проверяемое разложением в ряд по \mathbf{b} , находим окончательно

$$E(\tau) = \exp \left[\frac{\exp(\lambda \tau) - 1}{\lambda} \mathbf{b} \right] \exp(\tau \mathbf{a}). \quad (\text{Б. 8})$$

Б. 4. Даже если отличны от нуля все коммутаторы, есть случай, допускающий простое решение.

Коммутирование можно рассматривать как операцию, действующую на множестве, в которое входят операторы \mathbf{a} и \mathbf{b} и все их коммутаторы. Если это множество фактически окажется конечным, то при последовательном коммутировании мы будем возвращаться к уже имеющимся элементам. Рассматриваемая операция будет иметь циклический характер.

Естественно, что при этом можно разложить искомую функцию по элементам множества и задача сведется к нахождению конечного числа соответствующих коэффициентов разложения [43, 137].

Пусть, например, имеют место соотношения*

$$[\mathbf{a}, \mathbf{b}] = \mathbf{c}, \quad [\mathbf{a}, \mathbf{c}] = -\lambda \mathbf{a}, \quad [\mathbf{b}, \mathbf{c}] = \lambda \mathbf{b}.$$

Наше множество состоит из трех элементов: \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} . Соответственно этому ищем решение в виде

$$E(\tau) = \exp[\alpha(\tau) \mathbf{b}] \exp[\beta(\tau) \mathbf{c}] \exp[\gamma(\tau) \mathbf{a}], \quad (\text{Б. 9})$$

где α , β и γ — неизвестные функции τ . Дифференцируя это выражение по τ , получим

$$\begin{aligned} \mathbf{a} + \mathbf{b} &= \alpha'(\tau) \mathbf{b} + \beta'(\tau) \exp(\alpha \mathbf{b}) \mathbf{c} \exp(-\alpha \mathbf{b}) + \\ &+ \gamma'(\tau) \exp(\alpha \mathbf{b}) \exp(\beta \mathbf{c}) \mathbf{a} \exp(-\beta \mathbf{c}) \exp(-\alpha \mathbf{b}). \end{aligned}$$

Используя далее коммутационные соотношения и сравнивая коэффициенты при одинаковых операторах, найдем

$$\gamma'(\tau) = \exp(-\lambda \beta), \quad \beta'(\tau) = \alpha, \quad \alpha'(\tau) = 1 - \lambda \alpha^2/2.$$

* Парные коммутаторы трех операторов нельзя задавать независимо, так как необходимо выполнить тождество Якоби

$$[[\mathbf{a}, \mathbf{b}], \mathbf{c}] + [[\mathbf{b}, \mathbf{c}], \mathbf{a}] + [[\mathbf{c}, \mathbf{a}], \mathbf{b}] = 0.$$

Решения этих уравнений, обращающиеся в нуль при $\tau = 0$, имеют вид

$$\alpha = \gamma - \sqrt{\frac{2}{\lambda}} \operatorname{th} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{2}} \tau \right), \quad \beta = \frac{2}{\lambda} \ln \operatorname{ch} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{2}} \tau \right). \quad (\text{Б. 10})$$

Соотношения (Б. 9) и (Б. 10) решают поставленную задачу.

Рассмотренный пример отвечает квантовомеханической задаче об осцилляторе. Действительно, в этом случае

$$a = \frac{p^2}{2M}, \quad b = \frac{M\omega^2 x^2}{2}, \quad c = -\frac{\hbar^2 \omega^2}{2} \left(1 + 2x \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \lambda = 2\hbar^2 \omega^2.$$

Вычислим, пользуясь полученными формулами, следующую величину:

$$\begin{aligned} & \exp \left[\tau \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{M\omega^2 x^2}{2} \right) \right] \exp(ipx) = \\ & = [\operatorname{ch}(\hbar\omega\tau)]^{-1/2} \exp \left[\frac{\operatorname{th}(\hbar\omega\tau)}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{M\omega^2 x^2}{2} \right) \right] \times \\ & \quad \times \exp \left[\frac{ipx}{\operatorname{ch}(\hbar\omega\tau)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Б. 11})$$

С ее помощью может быть решен целый ряд задач, относящихся к осциллятору.

При вычислении выражения (Б. 11) нам пришлось иметь дело с функцией от произведения операторов $\exp \left(kx \frac{\partial}{\partial x} \right)$. Развитый выше аппарат в принципе применим и в этом случае. Однако проще использовать следующий искусственный прием. Используя новую переменную $\ln x$, приводим оператор к виду обычного оператора смещения

$$\exp \left(kx \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x) = \exp \left[k \frac{\partial}{\partial (\ln x)} \right] f[\exp(\ln x)] = f[\exp(k) x]. \quad (\text{Б. 12})$$

Таким образом, оператор $\exp \left(kx \frac{\partial}{\partial x} \right)$ играет роль оператора изменения масштаба.

Б. 5. В общем случае все коммутаторы a и b отличны от нуля и образуют бесконечное множество. Решение задачи при этом становится крайне сложным. Положение упрощается, если задача содержит малые параметры.

Пусть например, роль коммутаторов высшего порядка уменьшается с увеличением их сложности. Тогда можно искать разложение искомой функции в ряд по коммутаторам возрастающей сложности.

Каждый член этого ряда представляет собой в общем случае произведение отдельных коммутаторов. Порядком члена ряда будем называть полное число коммутаций, содержащихся в этом члене. Так, $[b, [b, a]]$ и $[b, a]^2$ имеют порядок, равный двум.

Обозначая через Q_n^m коммутатор $(n + m)$ -го порядка

$$Q_n^m = \left[\underbrace{a [a \dots [a [b \dots [b, a] \dots]]}_{m} \dots \right]_n$$

и через K_n — совокупность всех членов n -го порядка в операторе K , можно получить из выражения (Б. 3) следующее рекуррентное соотношение:

$$\frac{\partial K_n}{\partial \tau} = [a, K_{n-1}] + \sum_{k=1}^n \frac{(-\tau)^k}{k!} Q_k^0 K_{n-k}.$$

Несложное вычисление с учетом $K_0 = 1$ дает [46]

$$K_1 = -\frac{\tau^2}{2} Q_1^0; \quad (\text{Б. 13})$$

$$K_2 = \frac{\tau^3}{6} (Q_2^0 - Q_1^1) + \frac{\tau^4}{8} (Q_1^0)^2; \quad (\text{Б. 14})$$

$$K_3 = -\frac{\tau^4}{24} (Q_3^0 - Q_2^1 + Q_1^2) + \frac{\tau^5}{120} (3Q_1^1 Q_1^0 + \\ + 7Q_1^0 Q_1^1 - 4Q_1^0 Q_2^0 - 6Q_2^0 Q_1^0) - \frac{\tau^6}{48} (Q_1^0)^3; \quad (\text{Б. 15})$$

$$K_4 = \frac{\tau^5}{120} (Q_2^2 - Q_1^3 - Q_3^1 + Q_4^0) + \frac{\tau^6}{720} [3Q_1^2 Q_1^0 + 10(Q_1^1)^2 + \\ + 12Q_1^0 Q_1^2 - 4Q_1^1 Q_2^0 - 9Q_1^0 Q_2^1 - 6Q_2^1 Q_1^0 - 16Q_2^0 Q_1^1 + \\ + 5Q_1^0 Q_3^0 + 10(Q_2^0)^2 + 10Q_3^0 Q_1^0] + \frac{\tau^7}{1680} [15Q_2^0 (Q_1^0)^2 - \\ - 11Q_1^0 Q_1^1 Q_1^0 - 19(Q_1^0)^2 Q_1^1 + 8(Q_1^1)^2 Q_2^0 + \\ + 12Q_1^0 Q_2^0 Q_1^0 - 5Q_1^1 (Q_1^0)^2] + \frac{\tau^8}{384} (Q_1^0)^4. \quad (\text{Б. 16})$$

и т. д.

Чтобы перейти к разложению в ряд по коммутаторам функции $f(a + b)$, достаточно заметить, что, согласно выражению (Б. 1), параметр τ играет роль оператора дифференцирования функции f по ее аргументу. Поэтому, ограничиваясь для простоты членами второго порядка, будем иметь

$$f(a + b) = f(a + b) - \frac{1}{2} f''(a + b) [b, a] + \\ + \frac{1}{6} f'''(a + b) \{[b, a] - [a, b, a]\} + \frac{1}{8} f^{IV}(a + b) [b, a]^2 + \dots \quad (\text{Б. 17})$$

Здесь, как и выше, число a в аргументе функции f и ее производных представляет собой собственное значение оператора a , отвечающее функции, на которую действует $f(a + b)$.

Б. 6. Если один из аргументов нашей функции мал по сравнению с другим, то мы приходим к задаче, являющейся операторным аналогом теории возмущений и состоящей в разложении $f(a + b)$ в ряд по малому аргументу. Получающаяся при этом формула отличается от ряда Тейлора членами, зависящими от коммутаторов.

Сначала рассмотрим разложение по b . Полагая

$$E(\tau) = L(\tau) \exp(\tau a),$$

дифференцируя это соотношение по τ и обозначая через L_n член n -го порядка по b , получим

$$\frac{\partial L_n}{\partial \tau} = L_{n-1} \exp(\tau a) b \exp(-\tau a), \quad L_n = \int_0^\tau dt L_{n-1} \exp(ta) b \exp(-ta).$$

Учитывая, что $L_0 = 1$, найдем [134]

$$E(\tau) = \exp(\tau a) + \int_0^\tau dt \exp(ta) b \exp[(\tau - t)a] + \dots \quad (\text{Б. 18})$$

Это выражение может быть представлено и в другом виде

$$E(\tau) = \left\{ 1 + \tau b + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tau^{n+1}}{(n+1)!} \left[\overbrace{a [a \dots [a, b] \dots]}^n \right] \right\} \exp(\tau a).$$

Из приведенных соотношений могут быть найдены и члены высшего порядка. Аналогично может быть получено и разложение по a

$$E(\tau) = \exp(\tau b) + \int_0^{\tau} dt \exp[(\tau - t)b] a \exp(tb) + \dots \quad (\text{Б. 18'})$$

Для обратной функции можно использовать простую формулу

$$(a + b)^{-1} = (1 + a^{-1}b)^{-1} a^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (a^{-1}b)^n a^{-1}. \quad (\text{Б. 19})$$

Рассмотрим теперь дифференцирование функции $E_{\lambda}(\tau) = \exp[\tau(a + \lambda b)]$ по параметру λ . Исходим из определения

$$\frac{\partial E_{\lambda}(\tau)}{\partial \lambda} = \frac{1}{\delta \lambda} [E_{\lambda + \delta \lambda}(\tau) - E_{\lambda}(\tau)]$$

и разлагаем экспоненту в ряд по $\delta \lambda$. В результате получаем

$$\frac{\partial E_{\lambda}(\tau)}{\partial \lambda} = \int_0^{\tau} dt E_{\lambda}(t) b E_{\lambda}(\tau - t). \quad (\text{Б. 20})$$

Учитывая далее, что $E_{\lambda}(\tau - t) = E_{\lambda}(-t) E_{\lambda}(\tau)$ и

$$E_{\lambda}(t) b E_{\lambda}(-t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left[\overbrace{a + \lambda b [a + \lambda b \dots [a + \lambda b, b] \dots]}^n \right], \text{ находим}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\lambda}(\tau)}{\partial \lambda} &= \left\{ \tau b + \right. \\ &+ \left. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tau^{n+1}}{(n+1)!} \left[\overbrace{a + \lambda b [a + \lambda b \dots [a + \lambda b, b] \dots]}^n \right] E_{\lambda}(\tau) \right\}. \quad (\text{Б. 21}) \end{aligned}$$

Это так называемая левая производная. Заменяя в выражении (Б. 20) $t \rightarrow t + \tau$, определим и правую производную

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\lambda}(\tau)}{\partial \lambda} &= E_{\lambda}(\tau) \left\{ \tau b - \right. \\ &- \left. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\tau)^{n+1}}{(n+1)!} \left[\overbrace{a + \lambda b [a + \lambda b \dots [a + \lambda b, b] \dots]}^n \right] \right\}. \quad (\text{Б. 22}) \end{aligned}$$

Более сложные правила, относящиеся к релятивистским задачам, можно найти в работе [43].

В. ИНТЕГРАЛЫ ОТ СИНГУЛЯРНЫХ ФУНКЦИЙ

В. 1. В теории многих частиц нередко приходится сталкиваться с интегралами от сингулярных функций, обращающихся в бесконечность в области интегрирования. Такие интегралы удобно представить в виде

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{F(x)}{\varphi(x)}, \quad (\text{В. 1})$$

где $F(x)$ — регулярная в области интегрирования функция, а $\varphi(x_i) = 0$ ($i = 1, 2, \dots$). Точки x_i представляют собой точки сингулярности рассматриваемой функции.

Такого рода интегралы не являются определенными величинами; необходимы специальные дополнительные условия, указывающие, в каком смысле следует понимать соответствующие полюса (или, как говорят, каковы правила их обхода).

Неопределенность интегралов от сингулярных функций является следствием неопределенности самой сингулярной функции $\frac{1}{\varphi(x)}$ в точках x_i , в которых значение функции полностью неоднозначно. Можно положить

$$\frac{1}{\varphi(x)} = \begin{cases} \frac{1}{\varphi(x)} & x \neq x_i \\ A_i & x = x_i, \end{cases}$$

где A_i — некоторые совершенно произвольные величины. Это выражение можно представить в виде суммы так называемого главного значения сингулярной функции

$$P \frac{1}{\varphi(x)} = \begin{cases} \frac{1}{\varphi(x)} & x \neq x_i \\ 0 & x = x_i \end{cases} \quad (\text{В. 2})$$

и функции

$$D \frac{1}{\varphi(x)} = \begin{cases} 0 & x \neq x_i \\ A_i & x = x_i. \end{cases} \quad (\text{В. 3})$$

Сингулярную функцию следует рассматривать как обобщенную, т. е. нас интересуют не значения этой функции, а результат интегрирования ее с произвольными весовыми функциями $F(x)$. Поэтому, если величины A_i конечны, то вклад функции $D \frac{1}{\varphi}$ в интеграл равен нулю, и фактически сингулярная функция не отличается от своего главного значения. Реальный интерес представляет случай, когда величины A_i бесконечны, причем соответствующий интеграл по малой окрестности точки x_i вносит конечный вклад.

Вводя δ -функцию $\delta(x - x_i)$, которая равна нулю при $x \neq x_i$ и интеграл от которой по любой малой окрестности точки x_i равен единице, можно написать следующее выражение для функции (В. 3):

$$D \frac{1}{\varphi(x)} = \sum_i a_i \delta(x - x_i), \quad (\text{В. 4})$$

где a_i — по-прежнему произвольные величины*.

Чаще всего сингулярная функция имеет полюса первого порядка, т. е. $\varphi'(x_i) \neq 0$. Тогда последнее соотношение можно переписать в виде

$$D \frac{1}{\varphi(x)} = A(x) \delta[\varphi(x)],$$

* Хотя на первый взгляд в соотношении (В. 4) можно ввести еще производные δ -функции, на самом деле дифференцирование можно перебросить на функцию F .

где A — произвольная функция, не имеющая нулей и полюсов в точках x_i . В самом деле,

$$A(x) \delta[\varphi(x)] = \sum_i \frac{A(x_i)}{|\varphi'(x_i)|} \delta(x - x_i);$$

отождествляя $\frac{A}{|\varphi'|}$ с a_i , мы возвращаемся к соотношению (В. 4).

Итак, окончательный наиболее общий вид сингулярной функции $\frac{1}{\varphi(x)}$ можно получить, полагая

$$\frac{1}{\varphi(x)} = P \frac{1}{\varphi(x)} + A(x) \delta[\varphi(x)]. \quad (\text{В. 5})$$

Если рассматриваемая функция не имеет полюсов вообще, то получается тождество $1/\varphi = 1/\varphi$.

В. 2. Функции $P \frac{1}{\varphi}$ и $\delta(\varphi)$ можно записать в явном виде, используя некоторый предельный процесс

$$P \frac{1}{\varphi} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\varphi}{\varphi^2 + \delta^2}, \quad (\text{В. 6})$$

$$\delta(\varphi) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\delta}{\varphi^2 + \delta^2}. \quad (\text{В. 7})$$

Для доказательства рассмотрим значения обеих частей этих соотношений сначала в точках $x \neq x_i$. При этом $\varphi \neq 0$ и в пределе величина (В. 6) дает $\frac{1}{\varphi}$, а величина (В. 7) — нуль, что находится в соответствии с определениями рассматриваемых функций. Что же касается точек x_i , где $\varphi = 0$, то в согласии с выражением (В. 2) $P \frac{1}{\varphi(x_i)} = 0$, а $\delta[\varphi(x_i)] = \frac{1}{\pi\delta} \rightarrow \infty$. При этом интеграл*

$$\int_{x_i - \alpha}^{x_i + \beta} dx \delta[\varphi(x)] = \frac{1}{\pi} \int_{x_i - \alpha}^{x_i + \beta} dx \frac{\delta}{\varphi^2(x) + \delta^2}$$

оказывается равным, как это и должно быть, $\frac{1}{|\varphi'(x_i)|}$, в чем легко убедиться полагая $\varphi(x) = \varphi'(x_i)(x - x_i)$ и делая замену $x = x_i + \frac{\delta t}{|\varphi'(x_i)|}$.

Согласно соотношениям (В. 6), (В. 7), $P \frac{1}{\varphi}$ является нечетной, $\delta(\varphi)$ — четной функцией φ . В принципе можно было бы нарушить эти свойства в окрестности точек x_i , сохраняя в пределе правильные свойства рассматриваемых величин. При этом результаты вычисления соответствующих интегралов были бы иными. Поэтому обычно требуют, чтобы функция $P \frac{1}{\varphi}$ была пределом нечетной, а $\delta(\varphi)$ — четной функции φ ; иными словами, этими свойствами соответствующие выражения должны обладать еще до перехода к пределу.

* Интервал интегрирования выбран таким образом, чтобы в него попал лишь один полюс x_i .

Разлагая соотношения (В. 6) и (В. 7) в интеграл Фурье по φ , можно написать интегральные представления рассматриваемых функций

$$P \frac{1}{\varphi} = \frac{1}{2i} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{sign}(t) \exp(it\varphi - \delta|t|). \quad (\text{В. 8})$$

$$\delta(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(it\varphi - \delta|t|). \quad (\text{В. 9})$$

Можно показать, что интеграл типа (В. 1), взятый для определенности около одной из точек x_i , имеет вполне определенную величину при подстановке вместо $1/\varphi$ выражения (В. 5). В самом деле, в окрестности точки x_i можно сделать замену, аналогичную произведенной выше. Это даст с учетом выражений (В. 6) и (В. 7)

$$\int_{x_i - \alpha}^{x_i + \delta} dx \frac{F(x)}{\varphi(x)} = \frac{F(x_i)}{\varphi'(x_i)} \{ \ln(\beta/\alpha) + A(x_i) \}.$$

Появление логарифма характерно для интеграла от главного значения функции.

Таким образом, интеграл, содержащий как главное значение сингулярной функции*, так и δ -функцию, имеет вполне определенную величину.

В. 3. Особую роль в аппарате теории многих частиц играют следующие линейные комбинации функций $P \frac{1}{\varphi}$ и $\delta(\varphi)$:

$$\frac{1}{\varphi(\pm)} = P \frac{1}{\varphi} \pm i\pi\delta(\varphi). \quad (\text{В. 10})$$

Общее выражение (В. 5) представляется через них таким образом

$$\frac{1}{\varphi} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{iA}{\pi} \right) \frac{1}{\varphi(+)} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{iA}{\pi} \right) \frac{1}{\varphi(-)}. \quad (\text{В. 11})$$

Функции $\frac{1}{\varphi(\pm)}$ нетрудно выразить с помощью предельного процесса

$$\frac{1}{\varphi(\pm)} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\varphi \mp i\delta}. \quad (\text{В. 12})$$

В этом можно убедиться, перенося мнимый член в числитель и используя выражения (В. 6) и (В. 7).

С помощью интегральных представлений (В. 8) и (В. 9), можно выразить в интегральной форме и функции $\frac{1}{\varphi(\pm)}$

$$\frac{1}{\varphi(\pm)} = \pm i \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1 \mp \operatorname{sign}(t)}{2} \exp(it\varphi - \delta|t|) \quad (\text{В. 13})$$

* Он носит название интеграла в смысле главного значения и обозначается через

$$\int dx P \frac{1}{\varphi} F = P \int dx \frac{F}{\varphi}.$$

или

$$\frac{1}{\varphi + i\delta} = -i \int_0^{\infty} dt \exp(it\varphi - \delta |t|), \quad (\text{В. 14})$$

$$\frac{1}{\varphi - i\delta} = i \int_{-\infty}^0 dt \exp(it\varphi - \delta |t|). \quad (\text{В. 15})$$

В. 4. При вычислении интегралов от сингулярных функций типа (В. 1) весьма удобно использовать методы теории функций комплексного переменного, аналитически продолжая $\frac{F}{\varphi}$ в комплексную плоскость переменной x .

Практически обычно приходится иметь дело со случаем, когда аналитическое продолжение функции $\frac{F}{\varphi}$ в верхнюю или в нижнюю полуплоскости дает

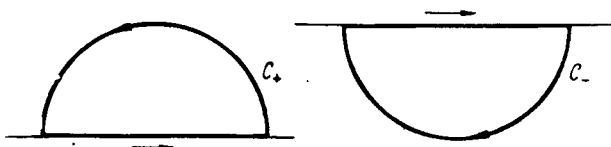


Рис. 69

функцию, удовлетворяющую следующим двум свойствам. Во-первых, эта функция убывает достаточно быстро на дуге большого круга * и, во-вторых, не имеет в рассматриваемой полуплоскости иных особенностей, кроме полюсов. Снабжая индексом \pm интеграл, для которого эти свойства выполнены соответственно в верхней и нижней полуплоскости, можно замкнуть контур интегрирования на большой дуге

$$I_{\pm} = \int_{C_{\pm}} dx \frac{F(x)}{\varphi(x)},$$

(контур C_{\pm} изображены на рис. 69). Используя теорему вычетов, можно написать

$$I_{\pm} = \pm 2\pi i \sum_{\text{выч}} \left(\frac{F}{\varphi} \right), \quad (\text{В. 16})$$

где сумма берется по всем полюсам подынтегрального выражения внутри контура интегрирования.

Часть этих полюсов связана непосредственно с точками x_i . Из соотношения (В. 11) видно, что достаточно исследовать полюса лишь функции $\frac{1}{\varphi(\pm)}$. Эти полюса расположены вблизи точек x_i , но находятся в комплексной плоскости. Полагая, что точка полюса \bar{x}_i , в которой $\varphi(\bar{x}_i) \pm i\delta = 0$, может быть представлена в виде $\bar{x}_i = x_i + \delta x_i$ ($\delta x_i \ll x_i$), имеем $\varphi'(x_i) \delta x_i \pm i\delta = 0$, откуда

$$\bar{x}_i = x_i \mp i \frac{\delta}{\varphi'(x_i)}.$$

* Предполагается, что интеграл от $\frac{F}{\varphi}$ по этой дуге дает исчезающий вклад.

Таким образом, рассматриваемый полюс функции $\frac{1}{\Phi_{(+)}(x)}$ лежит в нижней (при $\varphi' < 0$) или верхней (при $\varphi' > 0$) полуплоскости; для функции $\frac{1}{\Phi_{(-)}(x)}$ наблюдается обратное положение (рис. 70). Что же касается вычета в этом полюсе, то он имеет вид $\frac{F(x_i)}{\varphi'(x_i)} \frac{1}{2} \left(1 \mp i \frac{A(x_i)}{\pi} \right)$ соответственно для первого и второго слагаемого в выражении (В. 11).

Таким образом, вклад в I_{\pm} от полюсов x_i можно записать в виде

$$\sum_i F(x_i) \left(\frac{A(x_i)}{|\varphi'(x_i)|} \pm \frac{\pi i}{\varphi'(x_i)} \right), \quad (\text{В. 17})$$

где сумма берется по всем полюсам функции $\frac{1}{\Phi(x)}$. Кроме того, нужно учесть вычеты функции $\frac{F}{\Phi}$, не связанные с полюсами $\frac{1}{\Phi}$.

Рассмотрим некоторые важные частные случаи. Пусть в подынтегральном выражении имеются только те полюса, которые связаны с точками x_i . Тогда I_{\pm} совпадет с выражением (В. 17). Полагая $A(x) = -i\pi$, можно написать

$$I_{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx F(x) \frac{1}{\Phi(x)_{(-)}} = -\pi i \sum_i \frac{F(x_i)}{|\varphi'(x_i)|} \left(1 \mp \frac{\varphi'(x_i)}{|\varphi'(x_i)|} \right). \quad (\text{В. 18})$$

Иными словами, в этот интеграл дают вклад лишь те полюса $\frac{1}{\Phi(x)}$, для которых производная $\varphi'(x_i)$ отрицательна (или положительна). Аналогично, полагая $A(x) = i\pi$, найдем

$$I_{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx F(x) \frac{1}{\Phi(x)_{(+)}} = \pi i \sum_i \frac{F(x_i)}{|\varphi'(x_i)|} \left(1 \pm \frac{\varphi'(x_i)}{|\varphi'(x_i)|} \right). \quad (\text{В. 19})$$

Для получения соответствующего интеграла в смысле главного значения достаточно взять полусумму выражений (В. 18) и (В. 19). Это даст

$$I_{\pm} = P \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{F(x)}{\Phi(x)} = \pm \pi i \sum_i \frac{F(x_i)}{\varphi'(x_i)}. \quad (\text{В. 20})$$

Если имеется лишь один полюс с положительной производной, то

$$\left. \begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx F(x) \frac{1}{\Phi(x)_{(-)}} &= \begin{cases} 0 \\ -2\pi i \frac{F(x_i)}{\varphi'(x_i)} \end{cases} \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx F(x) \frac{1}{\Phi(x)_{(+)}} &= \begin{cases} 2\pi i \frac{F(x_i)}{\varphi'(x_i)} \\ 0 \end{cases} \\ P \int_{-\infty}^{\infty} dx E(x) \frac{1}{\Phi(x)} &= \begin{cases} \pi i \frac{F(x_i)}{\varphi'(x_i)} \\ -\pi i \frac{F(x_i)}{\varphi'(x_i)} \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (\text{В. 21})$$

где верхнее значение отвечает замыканию интеграла в верхней, нижнее — в нижней полуплоскости. Соотношения (В. 21) иллюстрируются рис. 71, а, б, где указаны полюса подынтегрального выражения первых двух интегралов. Нулевые значения этих интегралов соответствуют теореме Коши, так как при указанных условиях внутри контура интегрирования полюсов вообще нет.

Что же касается интеграла в смысле главного значения, то он берется по области, указанной на рис. 71, в жирной линией. При замыкании контура по боль-



Рис. 70

шой дуге видно, что этот интеграл равен интегралу по малому контуру C_i , т. е. полувычету подынтегрального выражения в точке x_i .

В. 5. Факт исчезновения некоторых интегралов в соотношениях (В. 21) имеет отношение к вопросу причинности. Рассмотрим интеграл по ε , входящий в функцию распространения (см. § 10):

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \cdot \frac{\exp(-i\varepsilon\tau)}{\varepsilon - \varepsilon_v + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_v - \varepsilon_F)}, \quad (\text{В. 22})$$

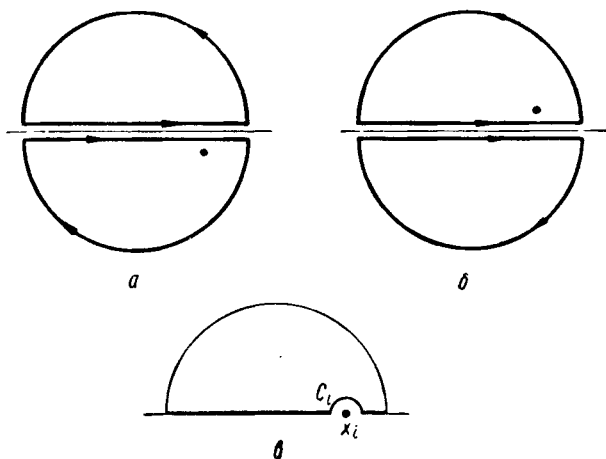


Рис. 71

где $\tau = t_1 - t_2$. При $\varepsilon_v < \varepsilon_F$ сюда входит функция $\frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon_v)_{(+)}}$, при $\varepsilon_v > \varepsilon_F$ — функция $\frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon_v)_{(-)}}$. Вводя числа заполнения $n_v = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_v)$, можно написать

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \exp(-i\varepsilon\tau) \left\{ \frac{n_v}{(\varepsilon - \varepsilon_v)_{(+)}} + \frac{1 - n_v}{(\varepsilon - \varepsilon_v)_{(-)}} \right\}.$$

Возможность замыкания интеграла в верхней или нижней полуплоскости тесно связана со знаком разности времен τ . Записывая комплексное ε в виде $\alpha + i\beta$, имеем

$$\exp(-i\varepsilon\tau) = \exp(-i\alpha\tau) \exp(\beta\tau).$$

С удалением от действительной оси, т. е. когда $|\beta| \rightarrow \infty$, фактор $\exp(\beta\tau)$ неограниченно растет при $\beta\tau > 0$ и падает при $\beta\tau < 0$. Замыкание возможно лишь в последнем случае. При $\tau > 0$ замыкать следует в нижней ($\beta < 0$) полуплоскости, при $\tau < 0$ — в верхней ($\beta > 0$).

Непосредственно используя соотношения (B. 21), будем иметь

$$I = \begin{cases} -i(1 - n_\nu) \exp(-i\varepsilon_\nu\tau) & \tau > 0 \\ in_\nu \exp(-i\varepsilon_\nu\tau) & \tau < 0. \end{cases} \quad (\text{B. 22}')$$

Таким образом, вперед по времени ($\tau > 0$) распространяются только частицы, назад по времени ($\tau < 0$) — только дырки. Это и является отражением причинности. Соответствующий обход полюса [функция $i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_\nu - \varepsilon_F)$ в знаменателе] называется причинным (или обходом по Фейнману).

В. 6. Вычислим некоторые конкретные интегралы по энергии ε от произведения нескольких функций Грина $G_\mu(\varepsilon)$.

Рассмотрим сначала произведение двух функций Грина

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \{ [\varepsilon - \varepsilon_{\mu_1} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\mu_1} - \varepsilon_F)] \times \\ \times [\varepsilon - \varepsilon_{\mu_2} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_F)] \}^{-1} \quad (\text{B. 23})$$

В данном случае контур можно замыкать как сверху, так и снизу. Из расположения полюсов подынтегрального выражения

$$\varepsilon_{1,2} = \begin{cases} \varepsilon_{\mu_{1,2}} - i\delta & \varepsilon_{\mu_{1,2}} > \varepsilon_F \\ \varepsilon_{\mu_{1,2}} + i\delta & \varepsilon_{\mu_{1,2}} < \varepsilon_F \end{cases}$$

видно, что если энергии $\varepsilon_{\mu_{1,2}}$ находятся по одну сторону от границы Ферми, то интеграл тождественно равен нулю. При этом оба полюса находятся по одну сторону от действительной оси. При замыкании контура в противоположной полуплоскости, согласно теореме Коши, получается нулевой результат. Таким образом, нужно рассмотреть два случая: $\varepsilon_{\mu_1} > \varepsilon_F$ и $\varepsilon_{\mu_2} < \varepsilon_F$; $\varepsilon_{\mu_1} < \varepsilon_F$ и $\varepsilon_{\mu_2} > \varepsilon_F$.

Для определенности будем замыкать контур в верхней полуплоскости. В первом случае внутри контура интегрирования содержится полюс $\varepsilon = \varepsilon_{\mu_2} + i\delta$. Вычет в нем равен $*(\varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_1} + i\delta)^{-1}$, значит,

$$I = \frac{i}{\varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_1} + i\delta}.$$

Во втором случае нужно просто сделать замену индексов $1 \leftrightarrow 2$. Суммируя полученные результаты и вводя числа заполнения, можно написать

$$I = i \left[\frac{(1 - n_{\mu_1}) n_{\mu_2}}{\varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_1} + i\delta} + \frac{(1 - n_{\mu_2}) n_{\mu_1}}{\varepsilon_{\mu_1} - \varepsilon_{\mu_2} + i\delta} \right]. \quad (\text{B. 24})$$

Перейдем к интегралу от произведения трех функций Грина

$$I = \int \frac{d\varepsilon_1 d\varepsilon_2}{(2\pi)^2} \{ [\varepsilon_1 - \varepsilon_{\mu_1} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\mu_1} - \varepsilon_F)] \times \\ \times [\varepsilon_2 - \varepsilon_{\mu_2} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_F)] \times \\ \times [\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_{\mu_3} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_F)] \}^{-1}. \quad (\text{B. 25})$$

* Никакой разницы между $2i\delta$ и $i\delta$ при $\delta \rightarrow 0$, конечно, нет.

Произведем сначала интегриацию по ε_2 . Соответствующий интеграл сводится к выражению (В. 18), если сделать замену $\varepsilon_{\mu_3} \rightarrow \varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_1$. В результате получим выражение

$$i \left[\frac{(1 - n_{\mu_2}) n_{\mu_2}}{\varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} + \varepsilon_1 + i\delta} + \frac{(1 - n_{\mu_2}) n_{\mu_3}}{\varepsilon_{\mu_3} - \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_1 + i\delta} \right].$$

Повторный интеграл распадается на линейную комбинацию двух интегралов

$$I_{\pm} = \int \frac{d\varepsilon_1}{2\pi} \{ [\varepsilon_1 - \varepsilon_{\mu_1} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\mu_1} - \varepsilon_F)] [\varepsilon_1 + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} \pm i\delta] \}^{-1}.$$

В интеграле I_+ удобно произвести замыкание в верхней полуплоскости. Единственный полюс, который нужно учитывать при $\varepsilon_{\mu_1} < \varepsilon_F$, расположен в точке $\varepsilon_{\mu_1} + i\delta$. При $\varepsilon_{\mu_1} > \varepsilon_F$ все полюса находятся по одну сторону действительной оси и вносят нулевой вклад. Таким образом,

$$I_+ = \frac{i n_{\mu_1}}{\varepsilon_{\mu_1} + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} + i\delta}.$$

Аналогично

$$I_- = \frac{-i(1 - n_{\mu_1})}{\varepsilon_{\mu_1} + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} - i\delta}.$$

Окончательно

$$I = - \frac{(1 - n_{\mu_1})(1 - n_{\mu_2}) n_{\mu_3}}{\varepsilon_{\mu_1} + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} - i\delta} - \frac{n_{\mu_1} n_{\mu_2} (1 - n_{\mu_3})}{\varepsilon_{\mu_1} + \varepsilon_{\mu_2} - \varepsilon_{\mu_3} + i\delta}. \quad (\text{В. 26})$$

В некоторых случаях приходится иметь дело с кратными полюсами. Рассмотрим, например, интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \cdot \frac{F(\varepsilon)}{[\varepsilon - \varepsilon_{\nu} + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_F)]^2}, \quad (\text{В. 27})$$

где функция $F(\varepsilon)$ не имеет особенностей в верхней (или нижней) полуплоскости и ограничена на дуге большого круга. Замыкая контур в соответствующей полуплоскости и вычисляя вычет в кратном полюсе, будем иметь

$$I_- = i(1 - n_{\nu}) F'(\varepsilon_{\nu}). \quad (\text{В. 28})$$

Аналогично

$$I_+ = -i n_{\nu} F'(\varepsilon_{\nu}). \quad (\text{В. 29})$$

Здесь I_{\pm} интегралы, отвечающие замыканию в верхней (или нижней) полуплоскости.

В. 7. Характерный пример интеграла от сингулярной функции возникает при рассмотрении квантовомеханической задачи рассеяния. Уравнение Шредингера в системе центра масс имеет вид

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{r}) = MV\psi(\vec{r}).$$

Если перейти в импульсное представление и разделить обе части уравнения на $k^2 - p^2$, то получим

$$\psi_{\vec{p}} = M \frac{(V\psi)_{\vec{p}}}{k^2 - p^2}.$$

Это выражение является неопределенным до тех пор, пока не приняты во внимание следующие требования, вытекающие из физической картины рассеяния:

решение должно содержать в качестве слагаемого плоскую падающую волну * $\psi_{\rightarrow} = \delta(p - k)$; второе слагаемое ψ_{\rightarrow} должно описывать расходящуюся волну, имеющую в координатном представлении при $r \rightarrow \infty$ асимптотический вид $\frac{\exp(ikr)}{r}$.

Оба эти условия полностью определяют сингулярную функцию $(k^2 - p^2)^{-1}$:

$$\frac{1}{k^2 - p^2} = C\delta(k^2 - p^2) + \frac{1}{k^2 - p^2 + i\delta}, \quad (\text{В. 30})$$

где $C(V\psi)_{\rightarrow} = \frac{1}{4\pi Mk}$. Выражение (В. 30) соответствует общему соотношению (В. 5), где нужно положить $A = C - i\pi$.

Первое слагаемое действительно дает нужный вклад, в чем легко убедиться, учитывая соотношение

$$\delta(k^2 - p^2) = \frac{\delta(k - p)}{2k},$$

где $k > 0$ и $p > 0$. Что же касается второго, то его вклад в ψ_{\rightarrow} дается выраже-

нием $\frac{M(V\psi)_{\rightarrow}}{k^2 - p^2 + i\delta}$. В координатном представлении это выражение имеет вид

$$M \int \frac{d^3p(V\psi)_{\rightarrow} \exp(ip \cdot \vec{r})}{k^2 - p^2 + i\delta}.$$

При больших r существенны малые значения p . Полагая силы короткодействующими и конечными по величине, найдем

$$\frac{M(V\psi)_0}{r} \int_0^{\infty} \frac{\sin(pr) p dp}{k^2 - p^2 + i\delta} = - \frac{M(V\psi)_0}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \int_0^{\infty} \frac{\cos(pr) dp}{k^2 - p^2 + i\delta}.$$

Входящий сюда интеграл можно записать в виде

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp \exp(ipr)}{k^2 - p^2 + i\delta} \sim \exp(ikr).$$

Здесь мы замкнули контуры в верхней полуплоскости ($r > 0$) и использовали соотношения, приведенные в разделе В. 4. Таким образом, мы действительно получаем расходящуюся волну. При изменении знака $i\delta$ получилась бы сходящаяся волна.

* Для простоты рассматривается лишь s -рассеяние.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хаар Д., тер. Введение в физику систем многих частиц. Пер. под ред. Д. Н. Зубарева. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
2. Вгюекнег К., Гаттел J. Phys. Rev., **109**, 1023 (1958); Вгюекнег K. Rev. Mod. Phys., **30**, 561 (1958).
3. Боголюбов Н. Н. Лекции по квантовой статистике. Киев, «Советская школа», 1949 (на укр. яз.).
4. Ландау Л., Лифшиц Е. Статистическая физика (классическая и квантовая) М. — Л., Гостехиздат, 1951.
5. Лифшиц И. М. «Природа», № 5, 11 (1958).
6. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М., Физматгиз, 1961.
7. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., Физматгиз, 1962.
8. Миндал А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **37**, 249 (1959); **40**, 684 (1961); **43**, 1940 (1962).
9. Боголюбов Н. Н., Толмачев В. В., Ширков Д. В. Новый метод в теории сверхпроводимости. М., Изд-во АН СССР, 1958.
10. Thouless D. J. The Quantum Mechanics of Many-body systems. Academic press, N.-Y. a. London, 1961.
11. Фрадкин Е. С. Диссертация. Ин-т теор. и эксперим. физ., 1960; «Ж. эксперим. и теор. физ.», **36**, 1286 (1959); **38**, 157 (1960); Nucl. Phys., **12**, 465 (1959).
12. Бонч-Бруевич В. Л., Коган Ш. М. Annals of Physics, **9**, 125 (1960).
13. Зубарев Д. Н. «Успехи физ. наук», **71**, 71 (1960).
14. Алексеев А. И. «Успехи физ. наук», **73**, 41 (1961).
15. Вопросы квантовой теории многих тел. Сборник переводов под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Изд-во иностр. лит., 1959; Вопросы квантовой теории необратимых процессов. Сборник переводов под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
16. The many-body problem (Cours donnés à l'école d'été de physique théorique. Les Houches, (1958). Methuen, London, 1959.
17. Proceedings of the International Congress on Many-particle problems. Utrecht, 1960.
18. Martin P., Schwinger J. Phys. Rev., **115**, 1342, (1959); Kadano ff L., Martin P. Phys. Rev., **124**, 670, (1960).
19. Боголюбов Н. Н. «Изв. АН СССР. Сер. физ.», **11**, 67 (1947).
20. Беляев С. Т. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 417, 433 (1958).
21. Вгюекнег К., Sawada K. Phys. Rev., **106**, 1117, 1128 (1957).
22. Константинов О. В., Перель В. И. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **39**, 197 (1960); Дзялошинский И. Е. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **32**, 1126 (1962).
23. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики. Пер. под ред. В. А. Фока. М., Физматгиз, 1960.
24. Ландау Л., Лифшиц Е. Квантовая механика, ч. 1. М., Гостехиздат, 1948.
25. Паули В. Общие принципы волновой механики. Пер. под ред. К. В. Никольского. М. — Л., Гостехиздат, 1947.
26. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М., «Высшая школа», 1961.
27. Швебер С., Бете Г., Гофман Ф. Мезоны и поля, т. 1. Пер. под ред. И. Е. Тамма. М., Изд-во иностр. лит., 1957. Ахизер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М., Физматгиз, 1959; Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. Введение в теорию квантованных полей. М., Гостехиздат, 1957.

28. Давыдов А. С. Теория атомного ядра. М., Физматгиз, 1958.
29. Бете Г., Солпитер. Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Пер. под ред. Я. А. Смородинского. М., Физматгиз, 1960.
30. Абрикосов А. А., Халатников И. М. «Успехи физ. наук», **65**, 551 (1958).
31. Gomes L., Walecka I., Weisskopf V. *Annals of Physics*, **3**, 241 (1958).
32. Ахизер А. И., Померанчук И. Я. Некоторые вопросы теории ядра. М. — Л., Гостехиздат, 1950.
33. Phillips R. *Repts Progr. Phys.*, **22**, 562 (1959); Gammet J., Thaler R. *Progr. Elementary Particle and Cosmic Ray Physics.*, **5**, 99 (1960).
34. Строение атомного ядра. Сборник переводов под ред. А. С. Давыдова. М., Изд-во иностр. лит., 1959.
35. Jastrow R. *Phys. Rev.*, **81**, 165, 636 (1951).
36. Huang K., Yang C. *Phys. Rev.*, **105**, 367 (1957); Martin P., De Dominicis C. *Phys. Rev.*, **105**, 1417 (1957).
37. Абрикосов А. А., Халатников И. М. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **33**, 1154 (1957).
38. Ваградов Г. М., Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **38**, 1499 (1960).
39. Силин В. П., Рухадзе А. А. Электромагнитные свойства плазмы и плазмолподобных сред. М., Госатомиздат, 1961.
40. Зельдович Я. Б. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **38**, 1123 (1960).
41. Wigner E. *Phil. Trans.*, **34**, 678 (1938).
42. Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **38**, 503 (1960).
43. Киржниц Д. А. «Тр. Физ. ин-та АН СССР», т. XVI, 3 (1961).
44. Компанеец А. С. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **25**, 540 (1953); **26**, 153 (1954).
45. Хартри Д. Расчеты атомных структур. Пер. под ред. В. А. Фока. М., Изд-во иностр. лит., 1960; Фок В. А. Юбилейный сборник АН СССР, ч. 1, 255 (1947).
46. Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **32**, 115 (1957).
47. Golden S. *Phys. Rev.*, **105**, 604 (1957).
48. Dirac P. A. M. *Proc. Cambridge. Philos. Soc.*, **26**, 376 (1930).
49. Гамбош П. Статистическая теория атома и ее применения. М., Изд-во иностр. лит., 1951.
50. Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 1625 (1958).
51. Компанеец А. С., Павловский Е. С. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **31**, 427 (1956).
52. Зельдович Я. Б., Рабинович Е. М. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **37**, 1296 (1959).
53. Alfred L. *Phys. Rev.*, **121**, 1275 (1961); Baraff G., Bogowitz S. *Phys. Rev.*, **121**, 1704 (1961); Baraff G. *Phys. Rev.*, **123**, 2087 (1961); Levine P., von Roos O. *Phys. Rev.*, **125**, 207 (1962).
54. Weizsäcker C. Z. *Phys.*, **96**, 431 (1935).
55. Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 1037 (1958).
56. Абрикосов А. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **39**, 1797 (1960); **41**, 569 (1961).
57. Борн М., Кунь Хуан. Динамическая теория кристаллических решеток. Пер. под ред. И. М. Лифшица. М., Изд-во иностр. лит., 1958.
58. Зейтц Ф. Современная теория твердого тела. Пер. под ред. Г. С. Жданова. М. — Л., Гостехиздат, 1949.
59. Абрикосов А. А. Вопросы космогонии, т. III. М., Изд-во АН СССР, 1954, стр. 11.
60. Гандельман Г. М., Павловский Е. С. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **38**, 1176 (1960); Гандельман Г. М. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **43**, 131 (1962).
61. Lattner R. *Phys. Rev.*, **99**, 1854 (1955).

62. Feynman R., Metropolis N., Teller E. Phys. Rev., 75, 1561 (1949); Latter R. J. Chem. Phys., 24, 280 (1956); Cowan K., Ashkin J. Phys. Rev., 105, 144 (1957).
63. Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 35, 1545 (1958).
64. Калиткин Н. Н. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 38, 1534 (1960).
65. Альтшуллер Л. В., Крупников К. К., Леденев Б. Н., Жучихи и В. И., Бражники М. И. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 34, 874 (1958).
66. Немировский П. Э. Современные модели атомного ядра. М., Госатомиздат, 1960.
67. Электромагнитная структура ядер и нуклонов. Сборник переводов под ред. С. И. Сыроватского. М., Изд-во иностр. лит., 1958; Rev. Mod. Phys., 30, 1 (1958).
68. Bell J., Squires E. Advances Phys., 10, 39 (1961).
69. Вгюескнер К., Gammel J., Kabis J. Phys. Rev., 118, 1095 (1960); Sood P., Moszkowski S. Nucl. Phys., 21, 582 (1960); Salpeter E. Annals of Physics, 11, 393 (1960); Cameron E. Astrophys. J., 130, 884 (1959); Levinger I., Simmons L. Phys. Rev., 124, 916 (1961).
70. Гомбаш П. «Успехи физ. наук», 49, 385 (1953); Gombás P. Fortschr. Phys., 5, 159 (1957).
71. Hara Y. Progr. Theoret. Phys., 24, 1179 (1960).
72. Ваградов Г. М., Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 43, 1301 (1962).
73. Бете Г., Бечер Р. Физика ядра, ч. 1. Харьков, Гос. науч.-техн. изд-во Украины, 1938.
74. Green A. Rev. Mod. Phys., 30, 569 (1958).
75. Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 37, 585 (1959).
76. Goldstone J. Proc. Roy. Soc., 239, 267 (1957).
77. Галицкий В. М. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 34, 151 (1958).
78. Hubbard J. Proc. Roy. Soc., 240, 539 (1957).
79. Klein A., Prange R. Phys. Rev., 112, 994, 1008 (1958).
80. Gell-Mann M., Low F. Phys. Rev., 84, 350 (1951).
81. Киржниц Д. А. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 35, 1198 (1958).
82. Bethe H. Phys. Rev., 103, 1353 (1956).
83. Киржниц Д. А. «Оптика и спектроскопия», 5, 485 (1958).
84. Hartree D., Hartree W. Proc. Roy. Soc. A, 150, 9 (1935).
85. Hullegas E. Z. Phys., 65, 209 (1930).
86. Зельдович Я. Б. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 31, 1101 (1956).
87. Цюнайтис Г. К., Кибартас В. В., Юцис А. П. «Оптика и спектроскопия», 1, 5 (1956).
88. Галицкий В. М., Мигдал А. Б. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 34, 139 (1957).
89. Ландау Л. Д. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 30, 1058 (1956); 32, 59 (1957) 35, 97 (1958); Абрикосов А. А., Халатилов И. М. «Успехи физ. наук», 64, 177 (1958).
90. Пятаевский Л. П. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 37, 1794 (1959).
91. Амуся М. Я. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 43, 942 (1962).
92. Low F. Phys. Rev., 97, 1392 (1955).
93. Иоффе Б. Л. В сб.: «Вопросы теории сильных и слабых взаимодействий элементарных частиц». Ереван, Изд-во АН Арм. ССР, 1962.
94. Алямовский В. Н., Киржниц Д. А. Труды Второго Всесоюзного совещания по квантовой химии. «Литовский физический сборник», III, № 1—2. Вильнюс, Гос. изд-во полит. и научн. лит. Лит. ССР, 1963.
95. Sawada K. Phys. Rev., 106, 372 (1957); Sawada K., Вгюескнер К., Fukuda N., Brout R. Phys. Rev., 108, 507 (1957).
96. Бонч-Бруевич В. Л. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 31, 522 (1956).
97. Källen G. Det Kgl. Danske, Mat.-fys., 27, 12 (1953); Lehmann H. Nuovo cimento, 11, 342 (1954).

98. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. М. — Л., Гостехиздат, 1951.
99. Киржниц Д. А., Файнберг В. Я., Фрадкин Е. С. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **38**, 239 (1960).
100. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел. Пер. под ред. А. А. Абрикосова М., Изд-во иностр. лит., 1956.
101. Агранович В. М., Гинзбург В. Л. «Успехи физ. наук», **76**, 643 (1962); **77**, 663 (1962).
102. Гинзбург В. Л., Рухадзе А. А., Силин В. П. «Физика твердого тела», III, 1835 (1961).
103. Лифшиц И. М., Косевич А. М. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **29**, 730 (1955).
104. Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов. М. — Л., Гостехиздат, 1951.
105. Мигдал А. Б. В сб.: «Вопросы теории сильных и слабых взаимодействий». Ереван, Изд-во АН Арм. ССР, 1962.
106. Hugenholtz N., Van Hove L. Physica, **24**, 363 (1958).
107. Карпман В. И. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **39**, 185 (1960).
108. Горьков Л. П. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 734 (1958).
109. Мигдал А. Б. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **32**, 399 (1957).
110. Fröhlich H. Proc. Roy. Soc. A, **215**, 291 (1952).
111. Бонч-Бруевич В. Л. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **130**, 343 (1956).
112. Мигдал А. Б. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 1438 (1958).
113. Толмачев В. В. Труды Второго Всесоюзного совещания по квантовой химии. «Литовский физический сборник», III, № 1—2. Вильнюс, Гос. изд-во полит. и научн. лит. Лит. ССР, 1963.
114. Климонтович Ю. Л., Силин В. П. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **23**, 151 (1952); Силин В. П. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **23**, 641 (1952).
115. Гинзбург В. Л. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 1593 (1958).
116. Кулик И. О. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **40**, 1344 (1961).
117. Амусья М. Я. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **41**, 429 (1961); **43**, 287 (1962).
118. Gell-Mann M., Goeckeler K. Phys. Rev., **106**, 364 (1957).
119. Gombás P. Acta phys. Akad. scient. hung., **13**, 233 (1961).
120. Lewis H. Phys. Rev., **111**, 1554 (1958).
121. Амбарцумян В. А., Саакян Г. С. «Астрон. ж.», **37**, 193 (1960).
122. Bloch F. Z. Phys., **81**, 363 (1933); Фейнберг Е. Л. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 1125 (1958); Собельман И. И., Фейнберг Е. Л. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 494 (1958).
123. Fox R. Advances in Mass Spectrometry. Perg. Press, London, 1959; J. Chem. Phys., **33**, 200 (1960).
124. Алямовский В. Н. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **42**, 1536 (1962).
125. Ландау Л. Д. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **34**, 262 (1958).
126. Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. «Докл. АН СССР», **126**, 53 (1959).
127. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **36**, 900 (1959).
128. McDougall D., Stoner E. Phil. Trans., **237**, 67 (1938).
129. Matzubaга T. Progr. Theoret. Phys., **14**, 351 (1955).
130. Фрадкин Е. С. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **36**, 951 (1959).
131. Веденов А. А., Ларкин А. И. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **36**, 1133 (1959).
132. Халатников И. М. «Докл. АН СССР», **87**, 539 (1952).
133. Lippman B., Schwinger J. Phys. Rev., **79**, 469 (1950).
134. Feynman R. Phys. Rev., **84**, 395 (1951).
135. Bloch F. Z. Phys., **74**, 295 (1932).
136. Glauber R. Phys. Rev., **84**, 395 (1951).
137. Fujiwaga I. Progr. Theoret. Phys., **7**, 433 (1952); Tani S. Progr. Theoret. Phys., **11**, 190 (1954).

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	3
Глава I. Необходимые сведения из квантовой механики	11
§ 1. Уравнение Шредингера и классификация систем многих частиц	—
§ 2. Основные сведения из теории представлений	22
§ 3. Представление чисел заполнения	27
Глава II. Системы многих частиц в приближении Хартри — Фока	36
§ 4. Приближение Хартри — Фока	—
§ 5. Приближение Томаса — Ферми	47
§ 6. Приложения к теории сильносжатого вещества	58
§ 7. Приложения к теории атомного ядра	68
Глава III. Теория возмущений и диаграммная техника	83
§ 8. Дырочный формализм	—
§ 9. Матрица рассеяния	89
§ 10. Свертки операторов	100
§ 11. Графическое представление элементов матрицы рассеяния	106
§ 12. Процессы низшего порядка	113
§ 13. Правила Фейнмана	121
§ 14. Общая структура матрицы рассеяния	126
§ 15. Матрица рассеяния и физические величины	133
§ 16. Отбор главных диаграмм	145
§ 17. Приложения к теории двухэлектронных атомов	158
§ 18. Приложения к теории атомного ядра	163
Глава IV. Метод функций Грина в квантовой механике	169
§ 19. Одночастичная функция Грина	—
§ 20. Парная функция Грина	175
§ 21. Возбужденные состояния системы (приближение Хартри — Фока)	188
§ 22. Возбужденные состояния системы (учет корреляционного взаимодействия)	196
§ 23. Спектральные представления функций Грина	213
§ 24. Квазичастицы	223
§ 25. Уравнения для функций Грина	240
§ 26. Теория разреженных систем многих частиц	249
§ 27. Теория сжатых систем многих частиц	258
§ 28. Приложения к теории коллективных колебаний	274
Глава V. Метод функций Грина в квантовой статистике	283
§ 29. Общие соотношения	—
§ 30. Приближение Хартри — Фока в квантовой статистике	291
	343

§ 31. Термодинамическая теория возмущений	299
§ 32. Метод функций Грина в квантовой статистике	307
§ 33. Приложения к теории плазмы	312
Приложения	318
А. Вычисление средних значений операторов	—
Б. Основные формулы операторного исчисления	323
В. Интегралы от сингулярных функций	330
Литература	339

Давид Абрамович Киржниц

ПОЛЕВЫЕ МЕТОДЫ ТЕОРИИ МНОГИХ ЧАСТИЦ

Редактор *Т. П. Калужная*

Переплет художника *Ю. К. Мосеева*

Техн. редактор *Н. А. Власова*

Корректор *Л. П. Балюк*

Сдано в набор 18/III 1963 г. Подписано в печ. 4/VI 1963 г.
 Бумага 60 × 90/16 Физич. печ. л. 21,5 Уч.-изд. л. 21,5¢
 Заказ изд. 674. Тираж 3800 экз. Т-04991. Зак. тип. 1378. Цена 1 р. 23 к.
 Госатомиздат, Москва, Центр, ул. Кирова, 18

СПИСОК ЗАМЕЧЕННЫХ ОПЕЧАТОК

Стр.	Строка или формула	Напечатано	Следует читать
42	6-я снизу	$\text{Sp} \{ [q_1 \dots$	$\text{Sp} \{ [W_{q_1} \dots$
67	9-я сверху	$x^3 \sim \left(\frac{Z}{a_0 Q} \right)^{1/2} .$	$x_3 \sim \left(\frac{Z}{a_0 Q} \right)^{1/2} .$
69	12-я »	энергия	энергии
163	Формула (18. 2)	$\dots = \int_0^p \dots$	$\dots = \int_0^p \dots$
207	Формула (22. 27)	$\dots = \Sigma_{\mu\nu} \dots$	$\dots = \Sigma_{\mu\nu} \dots$
214	6-я снизу	$\dots \exp (i\Delta \tilde{E}_n - i_1),$	$\dots \exp (i\Delta \bar{E}_n t_1),$
257	4-я сверху	$\dots \times \int d'q' \dots$	$\dots \times \int d^3q' \dots$
312	10-я снизу	Дайсона, имеющего	Дайсона, имеющему
335	Рис. 70: левый	$1/\Phi_{(+)}$	$1/\Phi_{(-)}$
	правый	$1/\Phi_{(-)}$	$1/\Phi_{(+)}$