Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 2 — 1963

Н. Н. БОГОЛЮБОВ (мл.), Б. И. САДОВНИКОВ

УРАВНЕНИЯ ХАРТРИ И ФОКА В МЕТОДЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Рассматривается первое приближение для функций Грина, соответствующее уравнениям Хартри и Фока. Показывается, что с помощью спектральных представлений можно однозначно определить равновесное решение упомянутых уравнений. В рассматриваемом приближении находится энергетический спектр системы взаимодействующих фермионов и показывается, что кроме индивидуальных возбуждений $E_{k_1} - E_{k_2}$ он содержит также и коллективную ветвь.

В предыдущей работе [1] нами была получена цепочка «зацепляющихся» уравнений для двувременных функций Грина. Здесь мы проиллюстрируем эти общие результаты на примере уравнений, соответствующих приближениям Хартри и Фока.

Мы проведем «расцепление» в системе уравнений для одновременных корреляционных функций распределения [2]—[3], а затем воспользуемся теоремой о вариации средних значений [1], примерно так же, как это было сделано нами для классических систем [4].

Рассмотрим вспомогательную задачу с гамильтонианом

$$H' = \sum_{1 \leqslant j \leqslant N} \Gamma_j(t) + \sum_{1 \leqslant j_1 < j_2 \leqslant N} \Phi(\vec{r}_{j_1} - \vec{r}_{j_2}) \tag{1}$$

и возьмем 1-е уравнение из цепочки, обозначенной в работе [1] номером (5), {1,5}:

$$i\hbar \frac{\partial D_1(t_1, x_1, x_1')}{\partial t} = \int \{\Gamma(t, x_1, x'') D_1(t, x'', x_1') - D_1(t, x_1, x'') \Gamma(t, x'', x_1')\} dx'' +$$

$$+ \int \{\Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \Phi(\vec{r}_1{}' - \vec{r}_2)\} D_2(t;\ x_1,\ x_2,\ x_1',\ x_2)\, dx_2.$$

Под знаком интеграла в это уравнение входит функция

$$D_2(t, x_1, x_2, x_1', x_2') = \langle \Psi^+(t, x_1') \Psi^+(t, x_2') \Psi(t, x_2) \Psi(t, x_1) \rangle . \tag{2}$$

В силу перестановочных соотношений для полевых операторов может записать

$$D_2(t, x_1, x_2, x_1', x_2) = \langle \Psi^+(t, x_1') \Psi(t_1, x_1) \Psi^+(t_1, x_2) \Psi(t, x_2) \rangle$$

$$\text{при } x_1 \neq x_2$$

или

$$D_2(t, x_1, x_2, x_1', x_2) = \langle \Psi^+(t_1, x_2) \Psi(t_1, x_2) \Psi^+(t_1, x_1') \Psi(t_1, x_1) \rangle$$

$$\text{при } x_1' \neq x_2.$$

Рассмотрим случай, когда эффективный радиус взаимодействия достаточно велик, что может практически иметь место при кулоновском взаимодействии. Тогда основное значение интеграла, входящее в изучаемое уравнение, происходит от области положений $\vec{r}_2$, удаленных от $\vec{r}_1$ или $\vec{r}_1{}'$. В такой ситуации мы для получения первого приближения пренебрежем корреляцией между операторами

$$\Psi^+(t, \vec{r}_1') \Psi(t, \vec{r}_1') \quad \text{и} \quad \Psi^+(t_1, \vec{r}_2) \Psi(t, \vec{r}_2)$$

и положим приближенно

$$D_2(t, x_1, x_2, x_1', x_2) = \langle \Psi^+(t_1, x_1') \Psi(t_1, x_1) \rangle \langle \Psi^+(t_1, x_2) \Psi(t_1, x_2) \rangle =$$

$$= D_1(t; x_1, x_1') D_1(t_1, x_2, x_2), \tag{3}$$

тогда наше уравнение примет вид

$$i\hbar \frac{\partial D_1(t; x_1, x_1')}{\partial t} = \int \{\Gamma(t_1; x_1, x'') D_1(t; x'', x_1') - \Gamma(t; x'', x_1') D_1(t, x_1, x'')\} dx'' +$$

$$+ \{U(t, \vec{r}_1) - U(t, \vec{r}_1')\} D_1(t_1, x_1, x_1'), \tag{4}$$

где

$$U(t, \vec{r}) = \int \Phi(\vec{r} - \vec{r}') D_1(t, x', x') dx' =$$

$$= \int \Phi(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{\sigma} \langle \Psi^+(t_1, \vec{r}', \sigma) \Psi(t_1, \vec{r}', \sigma) \rangle dr'.$$

Как видно, это уравнение есть не что иное, как известное приближенное уравнение самосогласованного поля Хартри.

Отметим, что

$$\sum_{\sigma} \langle \Psi^+(t; \vec{r}, \sigma) \Psi(t, \vec{r}, \sigma) \rangle = \langle \sum_{1 \leqslant j \leqslant N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) \rangle$$

представляет среднюю плотность числа частиц. $U(t_1\vec{r})$ — будет потенциальной энергией, обусловленной этой средней плотностью. Таким образом, в уравнении Хартри эффект взаимодействия частиц учитывается средним полем U, а именно к индивидуальному гамильтониану Γ добавляется потенциальная энергия U.

Проанализируем сейчас наше исходное приближение (3), которое запишем в несколько более общей форме

$$D_2(t, x_1, x_2, x_1', x_2') = D_1(t, x_1, x_1') D_1(t; x_2; x_2'). \tag{5}$$

Весьма существенным дефектом этого приближения является то, что оно не учитывает принципа Паули, т. е. в данном случае оно не учитывает свойств антисимметрии

$$D_2(t, x_1, x_2, x'_1, x'_2) = -D_2(t, x_2, x_1, x'_1, x'_2) = -D_2(t, x_1, x_2, x'_2, x'_1),$$

непосредственно следующих из перестановочных соотношений и определения (2). Усовершенствуем формулу (5) так, чтобы учесть эти свойства антисимметрии.

Пусть взаимодействие в рассматриваемой динамической системе является слабым, так что $\Phi(\vec{r})$ можно считать пропорциональной некоторому малому параметру λ. При нулевом значении этого параметра, т. е. при полном отсутствии взаимодействия, уравнения {1.5} теряют зацепляющуюся структуру: члены с D_{s+1} в уравнении для D_s отсутствуют. Таким образом, нетрудно проверить, что выражения

$$D_2(t, x_1, x_2, x'_1, x'_2) = D_1(t, x_1, x'_1) D_1(t; x_2, x'_2) - D_1(t; x_2, x'_1) D_1(t, x_1, x'_2)$$

и вообще (6)

$$D_s(t; x_1 \ldots x_s; x'_1 \ldots x'_s) = \sum_{(p)} (-1)^p p \{D_1(t, x_1, x'_1) \ldots D_1(t, x_s, x'_s)\}$$

(где сумма берется по всем p перестановкам аргументов $x_1 \ldots x_s$) точно удовлетворяют всем уравнениям {1,5}, а также свойствам антисимметрии. Поэтому в реальном случае, когда малый параметр λ отличен от нуля, можем считать формулу (6) приближенной с ошибкой порядка малости λ.

Возьмем первое из уравнений {1.5}. Так как член, содержащий D_2, пропорционален λ, подставляя в него выражение (6), получаем приближенное уравнение с точностью до величин второго порядка малости

$$i\hbar \frac{\partial D_1(t, x_1, x'_1)}{\partial t} = \int \{\Gamma(t, x_1, x'') D_1(t; x'', x'_1) - \Gamma(t, x'', x'_1) D_1(t, x_1, x'')\} dx'' +$$
$$+ \int \{\Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \Phi(\vec{r}'_1 - \vec{r}_2)\} \{D_1(t, x_1, x'_1) D_1(t, x_2, x_2) -$$
$$- D_1(t, x_2, x'_1) D_1(t, x_1, x_2)\} dx_2. \quad (7)$$

Это приближенное уравнение впервые было выведено и исследовано В. А. Фоком.

Воспользуемся этими результатами для получения приближенных уравнений в функциях Грина. Для этого, как и в нашей работе [4], рассматривающей случай классической механики, применим теорему о вариации средних значений. Используем ту ее форму, о которой говорилось в [1].

Положим опять

$$\Gamma = \frac{\overline{p}^2}{2m} + \delta\Gamma, \quad (8)$$

$$\delta\Gamma(t, x, x') = e^{-iEt} \Omega(x, x') \delta\xi + c.c.,$$

где $Im E \neq 0$, и наложим на $D_1(t, x_1, x'_1)$ граничные условия 1, 2 из работы [1], тогда

$$D_1(t, x_1, x'_1) = D_1^0(x_1, x'_1) + \delta D_1(t, x, x'_1),$$

53

$$\delta D_1 = e^{-iEt}\int G_1(E, x_1, x_1'; y, y')\,\Omega(y, y')\,dy\,dy' + cc, \tag{9}$$

где D_1^0 (x_1, x_1') выражение D_1, соответствующее статистическому равновесию в системе с независящим от времени гамильтонианом H.

Проварьируем уравнение Хартри (4) и применим к нему теорему о «вариациях», тогда придем к следующему приближенному уравнению для определения функции G_1:

$$\hbar E G_1(E, x_1, x_1'; y, y') = \Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{\vec r_1} - \Delta_{\vec r_1'}) + U(\vec r_1) -$$

$$- U(\vec r_1')\Big\} G_1(E, x_1, x_1'; y, y') + D_1^0(x_1, x_1^0)\int\{\Phi(\vec r_1 - \vec r_2) -$$

$$- \Phi(\vec r_1' - \vec r_2)\} G_1(E, x_2, x_2; y_1, y')\,dx_2 +$$

$$+ \frac{1}{2\pi}[\delta(x_1 - y) D_1^0(y', x_1') - \delta(x_1' - y') D_1^0(x_1, y)]. \tag{10}$$

Здесь

$$U(\vec r) = \int \Phi(\vec r - \vec r_2) D_1^0(x_2, x_2)\,dx_2.$$

Та же процедура с уравнением Фока приводит к несколько более сложному уравнению

$$\hbar E G_1(E, x_1, x_1'; y, y') = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{\vec r_1} - \Delta_{\vec r_1'}) G_1(E, x_1, x_1'; y, y') +$$

$$+ \int\{\Phi(\vec r_1 - \vec r_2) - \Phi(\vec r_1' - \vec r_2)\}\{D_1^0(x_1, x_1') G_1(E, x_2, x_2; y, y') +$$

$$+ D_1^0(x_2, x_2) G_1(E, x_1, x_1', y, y') - D_1^0(x_2, x_1') G_1(E, x_1, x_2, y, y') -$$

$$- D_1^0(x_1, x_2) G_1(E, x_2, x_1', y, y')\}\,dx_2 +$$

$$+ \frac{1}{2\pi}[\delta(x_1 - y) D_1^0(y', x_1') - \delta(x_1' - y') D_1^0(x_1, y)]. \tag{11}$$

Отметим, что подобные уравнения рассматривались в работе С. В. Тябликова и В. Л. Бонч-Бруевича [5].

Займемся определением D_1^0 (x_1, x'). Ограничимся рассмотрением только невырожденных состояний. Учитывая пространственную и спиновую однородность, положим

$$D_1^0(x, x') = D(\vec r - \vec r')\,\Delta(\sigma - \sigma').$$

Ясно, что уравнения Хартри и Фока, написанные для равновесной функции, удовлетворяются этим выражением при любой форме функции D. Возвращаясь к (10) и переходя в этом уравнении к t представлению, заметим, что ему удовлетворяют опережающая, запаздывающая и каузальная функции Грина, а следовательно, и их разность, поэтому

$$i\hbar\frac{\partial\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\Psi(t, x_1)\rangle}{\partial t} = \Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{\vec r_1} - \Delta_{\vec r_1'} + U(\vec r_1) -$$

$$- U(\vec r_1')\Big\}\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\Psi(t, x_1)\rangle + D_1^0(x_1, x_1')\int\{\Phi(\vec r_1 - \vec r_2) -$$

$$- \Phi(\vec r_1' - \vec r_2)\Big\}\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\Psi(t, x_1)\rangle\,dx_2. \qquad (12)$$

Обозначим

$$x_1 = (\vec{r}_1, \sigma_1); x_1' = (\vec{r}_1', \sigma_1'); \quad x_2 = (\vec{r}_2, \sigma_2);$$

$$y = (\vec{r}, \sigma); \quad y' = (\vec{r}_1' \sigma').$$

Будем неограниченно увеличивать расстояние между парами точек $(\vec{r}_1, \vec{r})$ и $(\vec{r}_1', \vec{r}')$. Тогда благодаря ослаблению корреляции выражение $\langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1')\, \Psi(t, x_1) \rangle$ будет распадаться на произведение

$$\langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(t, x_1) \rangle \langle \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1') \rangle.$$

Далее, поскольку $|\vec{r}_1 - \vec{r}_1'| \to \infty$,

$$D_1^0(x_1, x_1') = \langle \Psi^+(x_1')\, \Psi(x_1) \rangle \to \langle \Psi^+(x_1') \rangle \langle \Psi(x_1) \rangle = 0.$$

Таким образом, асимптотическая форма (12) будет

$$\left(i\hbar \frac{\partial \langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(t, x_1) \rangle}{\partial t} + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1} - U(\vec{r}_1) \right\} \langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(t, x_1) \rangle \right) \times$$

$$\times \langle \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1') \rangle + \left(i\hbar \frac{\partial \langle \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1') \rangle}{\partial t} - \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1'} - U(\vec{r}_1') \right\} \times \right.$$

$$\left. \times \langle \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1') \rangle \right) \langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(t, x_1) \rangle = 0,$$

откуда

$$\frac{i\hbar \dfrac{\partial \langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(t, x_1) \rangle}{\partial t} + \left(\dfrac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1} - U(\vec{r}_1) \right) \langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(t, x_1) \rangle}{\langle \Psi^+(\tau, y)\, \Psi(t, x_1) \rangle} =$$

$$= - \frac{i\hbar \dfrac{\partial \langle \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1') \rangle}{\partial t} - \left(\dfrac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1'} - U(\vec{r}_1') \right) \langle \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1') \rangle}{\langle \Psi(\tau, y')\, \Psi^+(t, x_1') \rangle}. \quad (13)$$

Хотя это соотношение и установлено нами как асимптотическое равенство, справедливое в пределе при неограниченном увеличении расстояний между двумя группами точек $(\vec{r}_1, \vec{r}) \leftarrow\rightarrow (\vec{r}', \vec{r}_1')$, нетрудно заметить, что оно имеет место везде. В самом деле, фиксируем произвольно y, x_1 и будем любым образом неограниченно отдалять точки $(\vec{r}_1, \vec{r}_1')$ от фиксированных точек $(\vec{r}_1, \vec{r})$.

Тогда в пределе будет выполняться соотношение (13). Его левая часть вообще не меняется в рассматриваемом процессе и не зависит от y', x_1', а правая не зависит от x_1, y. Поэтому левая часть всегда равна некоторой величине $\Lambda(t, \tau)$, не зависящей от x_1, y, y', x_1'. Изменив роль (x_1, y) и (x_1', y'), видим, что и правая часть везде равна этой величине.

Итак,

$$i\hbar \frac{\partial \langle \Psi^+(\tau, y) \Psi(t, x_1) \rangle}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1} + U(\vec{r}_1) \right) \langle \Psi^+(\tau; y) \Psi(t; x_1) \rangle + \Lambda(t, \tau) \times$$
$$\times \langle \Psi^+(\tau, y) \Psi(t, x_1) \rangle, \tag{14}$$
$$i\hbar \frac{\partial \langle \Psi(\tau, y') \Psi^+(t, x_1') \rangle}{\partial t} = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1'} - U(\vec{r}_1') \right) \langle \Psi(\tau, y') \Psi^+(t, x_1') \rangle -$$
$$- \Lambda(t, \tau) \langle \Psi(\tau, y') \Psi^+(t, x_1') \rangle.$$

Как уже отмечалось, операторы

$$\Psi^+(t, x_1') \Psi(t, x_1), \quad \Psi^+(\tau, y) \Psi(\tau, y'), \tag{15}$$

сохраняющие число N, не меняются, возьмем ли мы в качестве

$$\Psi(t, x), \quad \Psi^+(t, x) \tag{16}$$

представления Гейзенберга с гамильтонианом H или $H-\lambda N$. Мы могли бы даже взять гамильтониан в форме

$$H - f(t) N$$

или даже квантовый оператор, только коммутирующий с $\Psi(t, x)$, $\Psi^+(t, x)$, где $f(t)$ — произвольная c-функция.

Все равно появляющиеся у Ψ, Ψ^+ лишние фазовые множители в выражениях типа (15) скомпенсируются. Такая ситуация, однако, уже не возникнет для «однофермионных операторов» (16), не сохраняющих N, и здесь фазовые множители являются существенными.

Чтобы воспользоваться спектральными представлениями в случае, когда $A = \psi, \psi^+$; $B = \psi, \psi^+$, условимся определять операторные полевые функции как представления Гейзенберга с гамильтонианом большого ансамбля $H^{-\lambda N}$. Тогда можно показать, что в равенствах (14). $\Lambda(t, \tau) = \mathrm{const} = -\lambda$. Для этого рассмотрим положение, когда в некоторой сколь угодно малой и сколь угодно далекой области Ξ точек $(\vec{r})$ взаимодействие между частицами системы выключено. Иначе говоря, заменим в наших формулах бинарную потенциальную энергию $\Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ на $u(\vec{r}_1) u(\vec{r}_2) \Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, где функция $u(r)$ равна единице всюду вне области Ξ, а внутри ее $u = 0$.

Тогда, если x лежит внутри Ξ, имеем

$$i\hbar \frac{\partial \langle \Psi^+(\tau, y) \Psi(t, x_1) \rangle}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1} - \lambda \right) \langle \Psi^+(\tau, y) \Psi(t, x_1) \rangle.$$

Но в уравнении (14), написанном для взаимодействия $u(\vec{r}_1) u(\vec{r}_2) \times \Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, имеем $u(\vec{r}_1) = 0$ и потому

$$i\hbar \frac{\partial \langle \Psi^+(\tau, y) \Psi(t, x_1) \rangle}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}_1} + \Lambda(t, \tau) \right) \langle \Psi^+(\tau, y) \Psi(t, x_1) \rangle. \tag{17}$$

Отсюда вытекает, что $\Lambda(t_1 r) = \mathrm{const} = -\lambda$. Равенство это установлено для «вспомогательной» задачи фиктивной динамической системы, у которой потенциальная энергия пары частиц равна $u(\vec{r}_1) u(\vec{r}_2) \Phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$.

Однако если область Ξ стянуть в точку и удалить на бесконечность, тогда в пределе фиктивная система, очевидно, переходит в рассматриваемую нами систему с взаимодействием $\Phi(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$. Поэтому равенство (17) имеет место и для нее.

Таким образом, из (14) получим

$$i\hbar\frac{\partial\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(t, x_1)\rangle}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1}+U(\vec{r}_1)-\lambda\right\}\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(t, x_1)\rangle,$$

$$\frac{i\hbar\,\partial\langle\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\rangle}{\partial t}=-\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1'}+U(\vec{r}_1')-\lambda\right\}\langle\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\rangle.$$

Рассматривая случай пространственной однородности (случай, когда изучаемое состояние статистического равновесия не вырождено), имеем

$$\sum_{(\sigma_2)}D_1^0(x_{2_1}, x_2)=\sum_{(\sigma_2)}\langle\Psi^+(\vec{r}_2, \sigma_2)\Psi(\vec{r}_2, \sigma_2)\rangle=n$$

и

$$U(\vec{r})=n\int\Phi(\vec{r}-\vec{r}_1')\,d\vec{r}_1'=n\int\Phi(\vec{r})\,d\vec{r}=\text{const}.$$

Заметим, в частности, что для случая плазмы, когда мы имеем кулоновское взаимодействие с компенсирующим полем, это постоянное поле U вообще равно нулю.

Положив

$$\lambda'=\lambda-n\int\Phi(\vec{r})\,d\vec{r}, \tag{18}$$

мы видим, что для изучаемых средних получаются уравнения

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(t, x_1)\rangle}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1}-\lambda'\right\}\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(t, x_1)\rangle,\\
&i\hbar\frac{\partial\langle\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\rangle}{\partial t}=-\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_1'}-\lambda'\right\}\langle\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\rangle,
\end{aligned} \tag{19}$$

по своей форме совпадающие с уравнениями для средних при полном отсутствии взаимодействия. Роль взаимодействия сказывается здесь лишь в возможном сдвиге (18) химического потенциала λ (и то, например, в указанном случае плазмы этот сдвиг равен нулю). Естественно поэтому, что для данных средних мы получим те же формулы, что и для идеального газа. Действительно, заметим, что

$$\begin{aligned}
&\langle\Psi^+(\tau, y)\Psi(t, x_1)\rangle=\frac{1}{V}\sum_{k,k_1}\langle a_{k\sigma}^+(\tau)\,a_{k_1\sigma_1}(t)\rangle\, e^{i(\vec{k}\vec{r}-\vec{k}_1\vec{r}_1)},\\
&\langle\Psi(\tau, y')\Psi^+(t, x_1')\rangle=\frac{1}{V}\sum_{k,k'}\langle a_{k'\sigma'}(\tau)\,a_{k_1'\sigma_1'}^+(t)\rangle\, e^{i(\vec{k}'\vec{r}'-\vec{k}_1'\vec{r}_1')}.
\end{aligned} \tag{20}$$

Подставив эти выражения в (19), найдем

$$i\hbar\frac{\partial\langle a_{k\sigma}^+(\tau)\,a_{k_1\sigma_1}(t)\rangle}{\partial t}=\left(\frac{k_1^2}{2m}\hbar^2-\lambda'\right)\langle a_{k\sigma}^+(\tau)\,a_{k_1\sigma_1}(t)\rangle,$$

$$-i\hbar \frac{\partial \langle a_{k'\sigma'}(\tau) a^{+}_{k'_1\sigma'_1}(t) \rangle}{\partial t} = \left(\frac{k_1'^2}{2m}\hbar^2 - \lambda' \right) \langle a_{k'\sigma'}(\tau) a^{+}_{k'_1\sigma'_1}(t) \rangle .$$

Откуда

$$\langle a^{+}_{k\sigma}(\tau) a_{k_1\sigma_1}(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{k_1^2}{2m}\hbar^2 - \lambda'\right)(t-\tau)} \langle a^{+}_{k\sigma}(t) a_{k_1\sigma_1}(t) \rangle =$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{k_1^2}{2m}\hbar^2 - \lambda'\right)(t-\tau)} \langle a^{+}_{k\sigma}(0) a_{k_1\sigma_1}(0) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{k_1^2}{2m}\hbar^2 - \lambda'\right)(t-\tau)} \langle a^{+}_{k\sigma} a_{k_1\sigma_1} \rangle \qquad (21)$$

и также

$$\langle a_{k'\sigma'}(\tau) a^{+}_{k'_1\sigma'_1}(t) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{k_1'^2}{2m}\hbar^2 - \lambda'\right)(t-\tau)} \langle a_{k'\sigma'} a^{+}_{k'_1\sigma'_1} \rangle .$$

Заменим

$$\sigma' \to \sigma_1; \quad \sigma'_1 \to \sigma, \quad t \to \tau; \quad \tau \to t. \quad k'_1 \to k'; \quad k' \to k, \qquad (22)$$

получим

$$\langle a_{k\sigma_1}(t) a^{+}_{k'\sigma}(\tau) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{k'^2}{2m}\hbar^2 - \lambda'\right)(t-\tau)} \langle a_{k\sigma_1} a^{+}_{k'\sigma} \rangle .$$

Воспользовавшись спектральными формулами {1,8}, имеем

$$\langle a^{+}_{k',\sigma}(\tau) a_{k,\sigma_1}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega, k', \sigma, k, \sigma_1) e^{i\omega(t-\tau)} d\omega,$$

$$\langle a_{k,\sigma_1}(t) \overset{+}{a}_{k',\sigma}(\tau) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega, k', \sigma, k, \sigma_1) e^{+\frac{\omega\hbar}{\theta} - i\omega(t-\tau)} d\omega.$$

Сравнивая их с (21), (22), видим, что

$$\langle \overset{+}{a}_{k',\sigma}(\tau) a_{k,\sigma_1}(t) \rangle = 0 \quad k \neq k'. \qquad (23)$$

$$\langle a_{k,\sigma}(t) \overset{+}{a}_{k',\sigma}(\tau) \rangle = 0 \quad k \neq k',$$

$$\langle a_{k,\sigma_1} \overset{+}{a}_{k,\sigma} \rangle = e^{\left(\frac{k^2}{2m}\hbar^2 - \lambda'\right)\frac{1}{\theta}} \langle \overset{+}{a}_{k,\sigma} a_{k,\sigma_1} \rangle . \qquad (24)$$

Но в силу перестановочных соотношений

$$\langle a_{k\sigma_1} \overset{+}{a}_{k\sigma} \rangle + \langle \overset{+}{a}_{k\sigma} a_{k\sigma_1} \rangle = \Delta(\sigma - \sigma_1). \qquad (25)$$

Из (24) и (25) найдем окончательно

$$\langle \overset{+}{a}_{k\sigma} a_{k\sigma_1} \rangle = \Delta(\sigma - \sigma_1) \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{k^2}{m}\hbar^2 - \lambda'\right)\frac{1}{\theta}}},$$

$$\langle \overset{+}{a}_{k\sigma_1} a_{k\sigma}\rangle = \Delta(\sigma-\sigma_1)\,\frac{e^{\left(\frac{k^2}{2m}\hbar^2-\lambda'\right)\frac{1}{\theta}}}{1+e^{\left(\frac{k^2}{2m}\hbar^2-\lambda'\right)\frac{1}{\theta}}}. \tag{26}$$

Итак,

$$n_k=\sum_{(\sigma)}\langle \overset{+}{a}_{k\sigma} a_{k\sigma}\rangle=\frac{2}{1+e^{\left(\frac{k^2}{2m}\hbar-\lambda'\right)\frac{1}{\theta}}}. \tag{27}$$

Отсюда плотность числа частиц будет

$$n=\frac{N}{V}=\frac{1}{V}\sum_{(k)} n_k\,\frac{1}{(2\pi)^3}\int n_k d\vec{k}=\frac{2}{(2\pi)^3}\int\frac{d\vec{k}}{1+e^{\left(\frac{k^2\hbar^2}{2m}-\lambda'\right)\frac{1}{\theta}}},$$

и мы можем определить λ' через среднюю плотность числа частиц n. Далее с помощью (21, 20, 23, 26, 27) найдем

$$\langle \overset{+}{\Psi}(\tau, y)\,\Psi(t, x_1)\rangle=$$

$$=\frac{\Delta(\sigma-\sigma_1)}{2(2\pi)^3}\int n_k \exp\left\{-i\,\frac{\left(\frac{k^2}{2m}\hbar^2-\lambda'\right)}{\hbar}(t-\tau)+i\bar{k}(\bar{r}_1-\bar{r})\right\}d\vec{k},$$

$$\langle \Psi(\tau, y')\,\overset{+}{\Psi}(t, x_1')\rangle= \tag{28}$$

$$=\frac{\Delta(\sigma'-\sigma_1')}{2(2\pi)^3}\int(2-n_{k'})\exp\left\{-i\,\frac{\left(\frac{k'^2}{2m}\hbar^2-\lambda'\right)}{\hbar}(\tau-t)+i\bar{k}'(\bar{r}'-\bar{r}_1')\right\}d\bar{n}'.$$

Следовательно, асимптотическая форма

$$\langle \overset{+}{\Psi}(\tau, y)\,\Psi(t_1 x_1)\rangle\,\langle \Psi(\tau, y')\,\overset{+}{\Psi}(t_1 x_1')\rangle$$

средней $\langle \overset{+}{\Psi}(\tau, y)\,\Psi(\tau, y')\,\overset{+}{\Psi}(t, x_1)\,\Psi(t, x_1)\rangle$ при неограниченном увеличении расстояния между парами точек $(\bar{r}_1\bar{r})$ и $(\bar{r}_1', \bar{r}')$ имеет вид

$$\frac{\Delta(\sigma-\sigma_1)\,\Delta(\sigma'-\sigma_1')}{4(2\pi)^6}\int\!\!\int n_k(2-$$

$$-n_{k'})\exp\left\{-i\,\frac{\left(\frac{k^2\hbar^2}{2m}-\frac{k'^2\hbar^2}{2m}\right)}{\hbar}(t-\tau)+i\bar{k}(\bar{r}_1-\right.$$

$$\left.-r)+i\bar{k}'(\bar{r}'-\bar{r}_1')\right\}dk\,dk'. \tag{29}$$

Таким образом, выражение (29) этой асимптотической формы имеет тот же вид, что и для идеального газа. Ее фурье — компоненты с фиксированными $\bar{k}$, $\bar{k}'$ имеют характер незатухающих колебаний с частотой

$$\frac{1}{\hbar}\left\{\frac{(k\hbar)^2}{2m}-\frac{(k'\hbar)^2}{2m}\right\}.$$

Эту частоту можно интерпретировать как соответствующие энергии

$$\frac{(k\hbar)^2}{2m} - \frac{(k'\hbar)^2}{2m}$$

квантового возбуждения, когда фермион с импульсом $\hbar\overline{k'}$ переходит в состояние с импульсом $\hbar\overline{k}$. Интегрируя (28), видим, что энергия возникновения фермиона с импульсом $\hbar k$ будет

$$\frac{(k\hbar)^2}{2m} - \lambda'.$$

Отсюда мы заключаем, что приближенное уравнение (10), полученное из уравнения Хартри, из которого мы исходили в рассматриваемом случае пространственной однородности, не учитывает влияния взаимодействия между частицами на изменение зависимости от импульса энергии элементарного возбуждения и на появление у него конечной ширины (эффект затухания). Чтобы учесть эти эффекты, нам следует работать с более точными уравнениями.

Проводя рассмотрение уравнения Фока в функциях Грина (11), мы найдем, что в этом случае эффективная энергия фермиона будет

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \Phi(\overline{R})\, e^{i\overline{q}\overline{R}} D(\overline{R})\, d\overline{R}.$$

Указанная добавка получается за счет взаимодействия фермиона с соседями.

Полученное приближение для случая уравнения Фока еще не учитывает эффекта затухания.

Заметим, что уравнения в функциях Грина (10), (11) кроме тривиального спектра $E_{k_1} - E_{k_2}$ имеют еще спектр коллективных колебаний.

Возьмем, например, уравнение (10). Решая его, найдем для фурье представления

$$G(Ex_1x_1'\, yy') = \int G_E(p_1p_1'\sigma_1\sigma_1';\ pp'\sigma\sigma')\, e^{-i\,(p_1r_1+p_1'r_1'-pr-p'r')}\, dp_1dp_1'dpdp'.$$

Решение этого уравнения удобно выразить через функцию

$$\rho(q; pp'\sigma\sigma') = \sum_{\sigma_1} \int G_E(k,\ q-k,\ \sigma_1\sigma_1 rr'\sigma\sigma')\, e^{-i(pr+p'r')}\, dkdrdr',$$

для которой найдем $\rho(q; pp'\sigma\sigma')$:

$$\rho(q; pp'\sigma\sigma') = \frac{\Delta(\sigma-\sigma')}{2(2\pi)^7}\, \frac{\dfrac{(n_{p'} - n_p)\,\delta(p+p'-q)}{\hbar E - \dfrac{\hbar^2}{2m}\left(p - \dfrac{q}{2}\right) q}}{1 + \dfrac{\nu(q)}{(2\pi)^3\hbar} \displaystyle\int \frac{\left\{n_{k+\frac{q}{2}} - n_{k-\frac{q}{2}}\right\}}{E - \dfrac{\hbar}{m}(kq)}\, dk}.$$

Отсюда видно, что искомый энергетический спектр системы взаимодействующих фермионов определяется уравнением

$$1 + \frac{\nu(q)}{(2\pi)^3\hbar} \int \frac{\left\{n_{k+\frac{q}{2}} - n_{k-\frac{q}{2}}\right\}}{E - \dfrac{\hbar}{m}(k\,q)}\, dk = 0.$$

Это уравнение было получено и детально исследовано в работе [6] Ю. Л. Климонтовича и В. П. Силина.

Заметим вообще, что обычный способ приближенного нахождения энергетического спектра для классических систем, предложенный А. А. Власовым, состоит в следующем.

Рассматривается равновесное решение уравнения самосогласованного поля D° и изучаются бесконечно близкие решения

$$D = D^{\circ} + \delta D,$$

у которых δD зависит от t как e^{-iEt}.

Полученное «секулярное уравнение» и определяет энергетический спектр. В методе функций Грина мы, естественно, получили то же уравнение, поскольку оно определяется только однородной частью уравнения, которая в сущности есть не что иное, как варьированное уравнение самосогласованного поля.

С другой стороны, в методе функций Грина, пользуясь спектральными представлениями, мы можем найти не только энергетический спектр, но и построить выражения для корреляционных средних и функций распределения.

Выражаем свою признательность С. В. Тябликову и Д. Н. Зубареву за ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физики, астрономии, № 1, ~~1962~~ 1963

2. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. Гостехиздат, М., 1946.

3. Боголюбов Н. Н. Лекции по квантовой статистике. «Радянська школа». Киев, 1949.

4. Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И. ЖЭТФ, **43**, вып. 2(8), 677, 1962.

5. Тябликов С. В., Бонч-Бруевич В. Л. Теория возмущений для двувременных температурных функций Грина. Математический институт АН СССР им. В. А. Стеклова, отд. теоретической физики (препринт), М., 1962.

6. Климонтович Ю. Л., Силин В. П. ЖЭТФ, **23**, вып. 1(7), 1952.

Поступила в редакцию
2. 7 1962 г.

Кафедра
статистической физики
и механики