ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаборатория теоретической физики

Р-309

В.Г.Соловьев

УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ СИСТЕМЫ N -ЧАСТИЦ В ЗАДАЧЕ МНОГИХ ТЕЛ

ДАН, 1959, т 126, н 4, с 755-758.

Дубна, 1959 год

P - 309

В.Г.Соловьев

УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ СИСТЕМЫ N -ЧАСТИЦ В ЗАДАЧЕ МНОГИХ ТЕЛ

В работе [1] Н.Н.Боголюбов предложил новый вариационный принцип, являющийся обобщением известного метода В.А.Фока[2]. Рассмотрение нового вариационного принципа было продолжено в [3-5]. Если в методе Фока минимум энергии можно найти на классе квазинезависимых волновых функций отдельных частиц, то в новом вариационном принципе - на более широком классе функций, а именно: кроме квазинезависимых волновых функций отдельных частиц учитываются волновые функции пар частиц.

Известно, что в ряде физических процессов большую роль играют корреляции нескольких частиц. Действительно, в явлении сверхпроводимости существенную роль играют взаимодействия пар электронов с равными и противоположно-направленными импульсами вблизи энергии поверхности Ферми. В атомном ядре важную роль играют парные корреляции нуклонов, находящихся на внешней оболочке, а в α - частичной модели ядра рассматриваются корреляции четырех частиц: двух протонов и двух нейтронов и т.д.

В связи с этим интересно получить уравнения, которые бы учитывали не только корреляции двух частиц, но также корреляции любого числа частиц. Метод, разработанный Н.Н.Боголюбовым[6], дает возможность подойти к учету корреляций N -частиц в задаче, где полное число частиц $N' \gg N$, т.е. по-существу, к учету корреляций N -частиц в среде. В настоящей работе воспользуемся этим методом для нахождения уравнения для волновой функции системы N -частиц в задаче многих тел, имея в виду применение его к тем процессам, в которых важную роль играют корреляции многих частиц.

Рассмотрим систему взаимодействующих ферми-частиц с гамильтонианом:

$$H = \sum_{f,f'} T(f',f)\, a_f^+ a_{f'} + \frac{1}{2} \sum_{f_1,f_2,f_1',f_2'} K(f_2',f_1';f_1,f_2)\, a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f_2'} a_{f_1'} , \qquad /1/$$

где $T(f',f) = E(f',f) - \lambda\,\delta(f-f')$, остальные обозначения даны в [5].

В [5] пользуясь новым вариационным принципом, авторы получили уравнения

$$\mathfrak{A}(f,f'|F,\psi) = 0 , \qquad \mathfrak{B}(f,f'|F,\psi) = 0 \qquad /2/$$

для нахождения

$$F(f,f') = \langle a_f^+ a_{f'} \rangle \ , \quad \Psi(f,f') = \langle a_f a_{f'} \rangle \ , \qquad /3/$$

где $\langle A \rangle = Sp\{A\mathcal{D}\}/Sp\mathcal{D}$, т.е. $\langle \ldots \rangle$ означает усреднение по некоторому статистическому оператору $\mathcal{D}$. В случае нестационарных процессов амплитуды a_f следует рассматривать в представлении Гейзенберга и тогда

$$i\frac{\partial F(f_1,f_2)}{\partial t} = \langle [a_{f_1}^+ a_{f_2}, H] \rangle \ , \quad i\frac{\partial \Psi(f_1,f_2)}{\partial t} = \langle [a_{f_1} a_{f_2}, H] \rangle , \qquad /4/$$

или на основании /6/

$$i\frac{\partial F(f_1,f_2)}{\partial t} = \mathcal{B}(f_1,f_2|F,\Psi) \ , \quad i\frac{\partial \Psi(f_1,f_2)}{\partial t} = \mathcal{U}(f_1,f_2|F,\Psi) . \qquad /5/$$

Рассмотрим корреляционную функцию

$$\langle a_{x_1} \ldots\ldots a_{x_N} a_{x_N'}^+ \ldots\ldots a_{x_1'}^+ \rangle$$

в x - представлении в случае, когда число частиц n является хорошим квантовым числом, поэтому выбросим из /1/ химический потенциал λ. Допустим, что эту корреляционную функцию можно представить в виде:

$$\langle a_{x_1} \ldots a_{x_N} a_{x_N'}^+ \ldots a_{x_1'}^+ \rangle = \Psi(x_1,\ldots x_N)\Psi^*(x_1',\ldots x_N') + \mathcal{S} \ , \qquad /6/$$

где $\mathcal{S}$ достаточно быстро стремится к нулю, когда расстояние между системами $/x_1,\ldots x_N/$ и $/x_1',\ldots x_N'/$ стремится к бесконечности, а интегралы вида:

$$\int |\Psi(x_1 \ldots x_N)|^2 dx_i \ , \qquad \text{при} \quad 1 \leq i \leq N$$

являются сходящимися. В этом случае $\Psi(x_1 \ldots x_N)$ можно интерпретировать как волновую функцию системы N - частиц.

Чтобы вывести уравнение, определяющее $\Psi(x_1 \ldots x_N)$, рассмотрим двухвременную корреляционную функцию

$$\langle a_{x_1}(t) \ldots a_{x_N}(t)\, a_{x_N'}^+(\tau) \ldots a_{x_1'}^+(\tau) \rangle ,$$

продифференцируем ее по времени t и получим

$$i\frac{\partial}{\partial t}\langle a_{x_1}(t)\ldots a_{x_N}(t)\,a^+_{x'_N}(\tau)\ldots a^+_{x'_1}(\tau)\rangle = \qquad /7/$$

$$=\langle\left[a_{x_1}(t)\ldots a_{x_N}(t),H\right]a^+_{x'_N}(\tau)\ldots a^+_{x'_1}(\tau)\rangle.$$

В этом уравнении содержатся корреляционные функции, содержащие $2N+2$ операторов. Перейдем к приближенному уравнению, выразив корреляционную функцию, содержащую $2N+2$ операторов, приближенно, через корреляционные функции двух и $2N$ операторов, следующим образом:

$$\langle a^+_f(t)\,a_{x_1}(t)\ldots a_{x_{i-1}}(t)\,a_{x_{i+1}}(t)\ldots a_{x_N}(t)\,a_{f_2}(t)\,a_{f'}(t)\,a^+_{x'_N}(\tau)\ldots a^+_{x'_1}(\tau)\rangle=$$

$$=\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}(-1)^N\langle a^+_f(t)\,a_{x_j}(t)\rangle\langle a_{x_1}(t)\ldots a_{x_{j-1}}(t)\,a_{f'}(t)\,a_{x_{j+1}}(t)\ldots$$

$$\ldots a_{x_{i-1}}(t)\,a_{x_{i+1}}(t)\ldots a_{x_N}(t)\,a_{f'}(t)\,a^+_{x'_N}(\tau)\ldots a^+_{x'_1}(\tau)\rangle + \qquad /8/$$

$$+(-1)^{N+1}\langle a^+_f(t)\,a_{f_2}(t)\rangle\langle a_{x_1}(t)\ldots a_{x_{i-1}}(t)\,a_{x_{i+1}}(t)\ldots a_{x_N}(t)\,a_{f'}(t)\,a^+_{x'_N}(\tau)\ldots$$

$$\ldots a^+_{x'_1}(\tau)\rangle+(-1)^N\langle a^+_f(t)\,a_{f'}(t)\rangle\langle a_{x_1}(t)\ldots a_{x_{i-1}}(t)\,a_{x_{i+1}}(t)\ldots$$

$$\ldots a_{x_N}(t)\,a_{f_2}(t)\,a^+_{x'_N}(\tau)\ldots a^+_{x'_1}(\tau)\rangle+\tilde{\xi}\,,$$

где $\tilde{\xi}$ содержит такие члены, которые стремятся к нулю при удалении совокупности $(x'_1\ldots x'_N)$ на бесконечность. Заметим, что при расщеплении /8/ число частиц n сохраняется. Ввиду того, что в стационарном состоянии волновая функция Ψ_t должна быть пропорциональна $e^{-iN\lambda t}$, то в общем неравновесном случае выделим этот множитель, а именно

$$\Psi_t(x_1\ldots x_N)=e^{-iN\lambda t}\,\Psi(x_1\ldots x_N). \qquad /9/$$

Подставим /8/ в /7/ и удалим совокупность $(y'_1 \ldots y'_N)$ на бесконечность; тогда, пользуясь /6/, получим следующее уравнение для волновой функции системы N - частиц:

$$
\begin{aligned}
& i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(y_1,\ldots y_N) + N\lambda\Psi(y_1,\ldots y_N) = \\
& = \sum_{i=1}^{N}\sum_{f} E(y_i,f)\Psi(y_1,\ldots y_{i-1},f,y_{i+1},\ldots y_N) + \\
& + \sum_{i>j=1}^{N}\sum_{f'_1,f'_2} K(f'_2,f'_1;y_i,y_j)\Psi(y_1,\ldots y_{j-1},f'_2,y_{j+1},\ldots y_{i-1},f'_1,y_{i+1},\ldots y_N) + \\
& + \sum_{i=1}^{N}\sum_{f,f'_1,f'_2}\Big\{K(f'_2,f'_1;y_i,f)F(f,f'_2)\Psi(y_1,\ldots y_{i-1},f'_1,y_{i+1},\ldots y_N) + \\
& + K(f'_2,f'_1;f,y_i)F(f,f'_1)\Psi(y_1,\ldots y_{i-1},f'_2,y_{i+1},\ldots y_N)\Big\} - \\
& - \sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\sum_{f,f'_1,f'_2} K(f'_2,f'_1;y_i,f)F(f,y_j)\Psi(y_1,\ldots y_{j-1},f'_2,y_{j+1},\ldots y_{i-1},f'_1,y_{i+1},\ldots y_N) .
\end{aligned}
\qquad /10/
$$

Рассмотрим уравнение для волновой функции системы N - частиц в задаче многих тел в двух частных случаях.

Первый случай: $f = (z, \sigma)$

$$
\begin{aligned}
& E(f,f') = E(z)\,\delta(f-f') , \\
& K(f'_2,f'_1;f_1,f_2) = \frac{1}{2}V(f_1,f_2)\Big\{\delta(f_1-f'_1)\,\delta(f_2-f'_2) - \delta(f_1-f'_2)\,\delta(f_2-f'_1)\Big\} ,
\end{aligned}
\qquad /11/
$$

причем $V(f_1, f_2) = V(|r_1 - r_2|, \sigma_1, \sigma_2)$.

В этом случае уравнение /10/ получим в виде

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, \dots x_N) = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \left[E(x_i) - \lambda \right] + \sum_{f} V(x_i, f) F(f, f) \right\} \Psi(x_1 \dots x_N) -$$

$$- \sum_{i=1}^{N} \sum_{f} V(x_i, f) F(f, x_i) \Psi(x_1 \dots x_{i-1}, f, x_{i+1}, \dots x_N) + \tag{12}$$

$$+ \sum_{i>j=1}^{N} V(x_i, x_j) \Psi(x_1, \dots x_N) -$$

$$- \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{j \neq i} \sum_{f} V(x_i, f) F(f, x_j) \Psi(x_1 \dots x_{j-1}, f, x_{j+1}, \dots x_N) \ ,$$

а уравнение для $F(f, f')$ запишем так:

$$i \frac{\partial}{\partial t} F(f, f') = \left\{ E(f') - E(f) \right\} F(f, f') +$$

$$+ \sum_{f''} \left\{ V(f', f'') - V(f, f'') \right\} \left\{ F(f, f') F(f'', f'') - F(f, f'') F(f'', f') + \Psi^*(f, f'') \Psi(f', f'') \right\} , \tag{13}$$

причем $F(f, f)$ и $\Psi(f, f')$ связаны между собой соотношениями

$$F(f, f') = \sum_{f''} \left\{ \Psi^*(f'', f) \Psi(f'', f') + F(f, f'') F(f'', f') \right\} ,$$

$$\sum_{f''} \left\{ \Psi(f, f'') F(f'', f') + \Psi(f', f'') F(f'', f) \right\} = 0 . \tag{14}$$

В стационарном случае

$$\frac{\partial F(f, f')}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, \dots x_N) = 0 \tag{15}$$

и когда $N = 2$, то /12/ совпадает с /21/ работы [5], а в случае $N = 1$ получаем уравнение метода Фока с тем отличием, что в уравнении для $F(f, f')$ учитывается корреляция пар частиц.

В качестве второго примера рассмотрим стационарный случай:

$$f = (p, \sigma) \quad , \quad E(f, f') = E(p)\,\delta(f - f')$$

$$K(f_2', f_1'; f_1, f_2) = V(p_2', p_1'; p_1, p_2)\,\delta(f_1 + f_2 - f_1' - f_2') \qquad /16/$$

в представлении, где $F(f, f')$ диагональна, т.е.

$$F(f, f') = F(p)\,\delta(f - f') \ ,$$

из /14/ следует, что

$$\Psi(f, f') = \Psi(f)\,\delta(f + f') \ , \ \Psi(p, +) = -\Psi(p) \ , \ \Psi(p, -) = \Psi(p) \ . \qquad /18/$$

Уравнение для $\Psi(y_1, \ldots y_N)$ получим в виде:

$$\sum_{i=1}^{N} \left\{ \left[E(p_i) - \lambda \right] \Psi(y_1, \ldots y_N) \right\} + \sum_{i>j=1}^{N} \sum_{f=(q,\sigma)} V(p_i + q, p_j - q; q; p_i, p_j) \Big[1 - \qquad /19/$$

$$- F(p_j) - F(p_i) \Big] \Psi(y_1, \ldots y_{j-1}, y_i + y_j - f, y_{j+1}, \ldots y_{i-1}, f, y_{i+1}, \ldots y_N) \Big\} = 0 \ ,$$

причем

$$F(p) = F(p)^2 + \Psi(p)^2 \ .$$

В этом случае роль среды сводится к появлению множителя $1 - F(p_j) - F(p_i)$ в члене взаимодействия.

Таким образом новый вариационный принцип и математический метод /6/, разработанные Н.Н. Боголюбовым, позволяют учитывать не только парные корреляции, но также и корреляции N -частиц в задаче многих тел. Заметим, что число частиц строго сохраняется в пространственно-однородных задачах и не сохраняется в случае пространственно-неоднородных задач.

В заключение выражаю глубокую благодарность академику Н.Н. Боголюбову за постоянный интерес к работе и весьма ценные замечания.

Работа поступила в издательский отдел
23 февраля 1959 года.

Литература

1. Н.Н.Боголюбову, ДАН, 119, 244 /1958/.
2. В.А.Фок. Zs. f.Phys.61,126 /1930/.
3. С.В.Тябликов, ДАН 121, 250 /1958/.
4. С.В.Тябликов, НДВШ 1, № 3 /1958/.
5. Н.Н.Боголюбов, В.Г.Соловьев, ДАН 124, № 5 /1959/.
6. Н.Н.Боголюбов, УФН, 67, № 4 /1959/.