Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им.Б.П.Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

И.А.Митропольский

# ВТОРИЧНОЕ КВАНТОВАНИЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ТЕОРИИ ЯДРА

# УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ ДЛЯ АСПИРАНТОВ



Гатчина 2020 Митропольский Иван Андреевич – доктор физико-математических наук.

Печатается по решению Учёного совета НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ (протокол заседания от 24.09.2020 №4).

**Митропольский И.А.** Вторичное квантование и функциональные методы в теории ядра. – Гатчина Ленинградской обл.: Изд-во НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2020 – 46 с.

Учебное пособие «Вторичное квантование и функциональные методы в теории ядра» рассчитано на аспирантов, осваивающих образовательную программу высшего образования по направлению 03.06.01 «Физика и астрономия» направленности 01.04.16 «Физика атомного ядра и элементарных частиц» в аспирантуре НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ. Оно также может быть полезно аспирантам, обучающимся по иным направленностям подготовки по данному направлению, и студентам старших курсов.

Содержание пособия углубляет и расширяет знания, полученные аспирантами на предыдущих уровнях обучения, в части применения современного аппарата вторичного квантования и функциональных методов в ядерной физике, в особенности в теории ядра и ядерных реакций.

Учебное пособие отражает материал лекций по курсу «Дополнительные главы квантовой механики в теории атомного ядра», читаемых автором на Физическом факультете СПбГУ. Оно представляет собой основных формул сводку с краткими комментариями, практические рекомендации по их использованию, и ядерно-физические примеры, позволяющие закрепить содержание отдельных теоретических положений по изучаемым темам.

В принципе, этого пособия должно быть достаточно для практической работы молодого специалиста в избранной области. Фундаментальные основы и дополнительный материал содержатся в рекомендованной литературе.

© НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2020

# СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕН	ИЕ	4
Глава 1.	МЕТОД ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ Фермионы и бозоны. Принцип Паули. Представление чисел заполнения, операторы рождения и уничтожения частиц. Коммутационные соотношения. Теорема Вика.	5
Глава 2.	ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ – ФОКА. ЧАСТИЧНО-ДЫРОЧНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ Среднее поле. Полная энергия системы. Теорема Купманса. Частично-дырочные конфигурации. Приближение Тамма – Данкова.	16
Глава 3.	МЕТОД ПРОИЗВОДЯЩИХ ФУНКЦИОНАЛОВ В ТЕОРИИ МНОГИХ ТЕЛ Алгебра Грассмана. Функциональные производные и интегралы. Гауссовы функциональные интегралы.	23
Глава 4.	ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ СВЕРХТЕКУЧЕГО ТИПА Каноническое преобразование. Гамильтониан в представлении квазичастиц. Уравнения Хартри – Фока Боголюбова. Модель с константным спариванием. Теорема Таулеса. Матричные элементы.	29
Глава 5.	ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ФАЗ В ТЕОРИИ ЯДРА Фононы и перестройка основного состояния. Квазибозонное приближение. Матричные элементы. Отделение «духовых» состояний. Правила сумм.	38
ЛИТЕРА	ТУРА	45

## ВВЕДЕНИЕ

Пособие ориентировано на аспирантов и студентов магистратуры, специализирующихся в области ядерной физики и прошедших подготовку по квантовой механике и теории поля (квантовой электродинамике) в университетском объёме.

В пособии подробно рассматриваются вопросы, связанные с методом вторичного квантования и его приложениями в ядерной физике. Особое внимание уделено функциональным методам, получившим развитие в теории многих тел, и позволяющим решать задачи, возникающие при описании ядерной структуры, распадов, ядерных реакций и переходов.

Круг теоретических вопросов, рассматриваемых в пособии, наиболее полно мог бы быть отнесён к теоретико-полевым и статистическим методам. Такой подход к многочастичной задаче - наиболее общий, он не только приводит к необходимым результатам, но и раскрывает глубокую взаимосвязь, на первый взгляд, независимых понятий и величин. Однако в теории ядра сложилась другая традиция, в ней используется индуктивный метод исследования по принципу «от частного к общему». Это находит отражение даже в терминологии. пособие написано «ядерщиком» И ориентировано Ланное на «ядерщиков», поэтому выбор стиля изложения был предопределен однозначно.

Теоретические вопросы в пособии иллюстрируются приложениями к теории ядра. Метод вторичного квантования и производящих функционалов применён для получения основных формул одночастичной модели ядра, учёта парных корреляций сверхтекучего типа и ядерных коллективных возбуждений. С другой стороны, в пособии опущены результаты конкретных расчётов и сравнение их с многочисленными экспериментальными данными.

Пособие не может рассматриваться как независимый учебник, скорее это конспект, содержащий основные формулы и краткие комментарии к ним. В конце пособия приводится список рекомендованной литературы.

4

## Глава 1. МЕТОД ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ

В отличие от классической динамики, где одинаковые частицы различимы и движутся каждая по своей траектории, в квантовой механике из-за принципа неопределённости невозможно указать какая именно частица оказалась в данной точке пространства, даже если в начальный момент времени частицы были локализованы однозначно. Таким образом, в квантовой механике, и в теории ядра в частности, говорят о неразличимости, или тождественности, частиц с одинаковыми внутренними свойствами. Так, например, тождественны между собой электроны, заполняющие атомную оболочку, или протоны и нейтроны по отдельности, составляющие атомное ядро. Тождественными являются также мезоны, осуществляющие связь нуклонов в ядре, и далее вглубь нуклона.

Принцип тождественности частиц приводит к квантовой статистике, отличной от статистики Больцмана для классических частиц<sup>1</sup>. Рассмотрим квантовую систему, состоящую из двух тождественных частиц. Волновая функция такой системы при перестановке частиц должна измениться только на фазовый множитель:

$$\psi(x_1, x_2) = e^{i\varphi}\psi(x_2, x_1),$$
 (1.1)

где  $x_i$  – совокупность пространственных и спиновых (изоспиновых) координат, а  $\varphi$  – вещественная постоянная. Повторная перестановка частиц приводит к исходному состоянию, т.е.  $e^{2i\varphi} = 1$  и

$$\psi(x_1, x_2) = \pm \psi(x_2, x_1). \tag{1.2}$$

Таким образом, волновая функция может быть только симметричной или антисимметричной при перестановке частиц.

Этот результат легко обобщается на квантовые системы, состоящие из произвольного числа одинаковых частиц. Волновая функция такой системы либо вообще не меняется, либо меняет свой знак при перестановке любой пары частиц. В первом случае говорят о частицах,

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Атомное ядро является системой большого числа тождественных частиц, но не бесконечного, а принципиально конечного. В теории ядра существует направление, основанное на применении статистических методов, но здесь речь пойдёт о методах описания свойств ядра и их изменений, связанных с изменением числа составляющих его частиц.

подчиняющихся статистике Бозе – Эйнштейна, или бозонах, во втором – статистике Ферми – Дирака для фермионов.

Рассмотрим квантовую систему из N тождественных частиц без взаимодействия. Пусть  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  и т.д. – волновые функции состояний, в которых может находиться каждая из этих частиц. Состояние системы описывается перечислением номеров состояний, в которых находятся отдельные частицы (в силу неразличимости мы не знаем, какая частица находится в каком состоянии, мы знаем только «список» заполненных состояний).

Для бозонов нормированная волновая функция системы -

$$\Psi_{N} = \sqrt{\frac{N_{1}!N_{2}!\cdots}{N!}} \sum \psi_{p_{1}}(x_{1})\psi_{p_{2}}(x_{2})\cdots\psi_{p_{N}}(x_{N}), \qquad (1.3)$$

где сумма берётся по всем перестановкам различных индексов  $p_1, p_2, ..., p_N$ , а целые числа  $N_i$  указывают, сколько из этих индексов имеют одинаковые значения  $i, \sum N_i = N$ . Нормировочный множитель в (1.3) связан с подсчётом числа перестановок индексов. Очевидно, что волновая функция вида (1.3) является симметричной относительно перестановки любой пары частиц.

Для фермионов нормированная волновая функция системы имеет вид детерминанта

$$\widetilde{\Psi}_{N} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_{1}}(x_{1}) & \psi_{p_{1}}(x_{2}) & \dots & \psi_{p_{1}}(x_{N}) \\ \psi_{p_{2}}(x_{1}) & \psi_{p_{2}}(x_{2}) & \dots & \psi_{p_{2}}(x_{N}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{p_{N}}(x_{1}) & \psi_{p_{N}}(x_{2}) & \dots & \psi_{p_{N}}(x_{N}) \end{vmatrix}.$$
(1.4)

В нём перестановке двух частиц соответствует перестановка столбцов. Такое представление волновой функции системы фермионов приводит к очень важному результату: если среди номеров  $p_1$ ,  $p_2$ , ... есть два одинаковых, то две строки детерминанта совпадают, и он обращается в нуль! Т.е. фермионы не могут находиться в одинаковых состояниях. Это утверждение составляет так называемый принцип Паули. Для описания систем, состоящих из большого числа тождественных частиц, используется метод вторичного квантования<sup>2</sup> или представление чисел заполнения.

Термин «вторичное квантование» может ввести в заблуждение<sup>3</sup>. Он не связан с каким-то «повторным квантованием» в квантовой механике. Это альтернативная формулировка обычной квантовой механики, являющаяся продолжением «матричной квантовой механики» В. Гейзенберга. Иногда говорят, что в этом подходе не только физические величины являются операторами, но и волновые функции становятся операторами. В этом представлении «числа заполнения», а не координаты и проекции спина играют роль независимых переменных.

Суть этого представления состоит в том, что состояние системы описываются волновой функцией в пространстве чисел заполнения  $\Phi(N_1, N_2, ...; t)$ . Её квадрат определяет вероятности различных значений чисел  $N_1, N_2, ...$  Операторы физических величин тоже должны формулироваться в терминах их влияния на числа заполнения.

1. Система бозонов, симметричные состояния.

Пусть  $\hat{f}_a^{(1)}$  – оператор какой-либо физической величины, относящийся к одной частице *a* и действующий только на функции переменных  $x_a$ . Симметричный по всем частицам оператор

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{a} \hat{f}^{(1)}_{a} \tag{1.5}$$

с суммированием по всем частицам действует на волновые функции (1.3). Каждый из операторов  $\hat{f}_a^{(1)}$  действует только на одну функцию в

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Этот метод предложен П. Дираком для описания излучения и поглощения фотонов в теории излучения и распространён Ю. Вигнером и П. Йорданом на системы фермионов. До сих пор используется система обозначений «бра-» и «кет-вектров», предложенная П. Дираком.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Термин «вторичное квантование» в англоязычной литературе часто заменяется термином «каноническое квантование». Последнее свободно от двусмысленного толкования и подчёркивает фундаментальное соответствие между квантовыми операторами и коммутаторами квантовой механики, и каноническими координатой и импульсом и скобкой Пуассона классической механики.

произведении  $\psi_{p_1}(x_1)\cdots\psi_{p_a}(x_a)\cdots\psi_{p_N}(x_N)$ . Матричные элементы оператора (1.5) будут отличны от нуля только для переходов без изменения чисел  $N_1, N_2, \ldots$  (диагональные элементы) и для переходов, при которых одно из этих чисел увеличивается, а другое уменьшается на единицу:

$$\langle N_i, N_k - 1 | \hat{F}^{(1)} | N_i - 1, N_k \rangle = \sqrt{N_i N_k} \langle i | f^{(1)} | k \rangle,$$
 (1.6)

где матричный элемент

$$\langle i|f^{(1)}|k\rangle \equiv f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(x_a) \hat{f}_a^{(1)} \psi_k(x_a) dx_a .$$
 (1.7)

Поскольку матричные элементы не зависят от индекса a, он может быть опущен. Диагональные элементы представляют собой среднее значение одночастичного оператора (1.5) по состояниям (1.3)

$$\overline{F}^{(1)} = \sum_{i} N_i \langle i | f^{(1)} | i \rangle.$$
(1.8)

Введём теперь основные в представлении вторичного квантования операторы  $\hat{b}_i$ , действующие уже не на функции координат, а на функции чисел заполнения. По определению оператор  $\hat{b}_i$  действует на функцию  $\Phi(N_1, N_2, ...)$ , уменьшая на единицу значение переменной  $N_i$ , одновременно умножая функцию на  $\sqrt{N_i}$ , т.е.

$$\hat{b}_i \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i, \dots) = \sqrt{N_i} \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots).$$
(1.9)

Можно сказать, что оператор  $b_i$  уменьшает на единицу число частиц, находящихся в состоянии i, поэтому его называют оператором уничтожения частиц. Его можно представить в виде матрицы, единственный от личный от нуля элемент которой –

$$\left\langle N_{i} - 1 \left| \hat{b}_{i} \right| N_{i} \right\rangle = \sqrt{N_{i}} . \tag{1.10}$$

Сопряжённый с  $\hat{b}_i$  оператор  $\hat{b}_i^+$  соответствует по определению матрице с единственным элементом

$$\left\langle N_i \left| \hat{b}_i^+ \right| N_i - 1 \right\rangle = \left\langle N_i - 1 \left| \hat{b}_i \right| N_i \right\rangle^* = \sqrt{N_i} . \tag{1.11}$$

Это означает, что при действии на функцию  $\Phi(N_1, N_2, ...)$  он увеличивает число  $N_i$  на единицу,

$$\hat{b}_{i}^{\dagger} \Phi (N_{1}, N_{2}, \dots, N_{i}, \dots) = \sqrt{N_{i} + 1} \Phi (N_{1}, N_{2}, \dots, N_{i} + 1, \dots).$$
(1.12)

Другими словами, оператор  $\hat{b}_i^+$  увеличивает число частиц в состоянии *i* на единицу, поэтому его называют оператором рождения частиц.

Произведение операторов  $\hat{b}_i^+ \hat{b}_i$ , действуя на волновую функцию, по смыслу оставляет все переменные  $N_1, N_2, ...$  и состояние в целом без изменения. Перемножая матрицы (1.11) на (1.10), получаем, что оператор  $\hat{b}_i^+ \hat{b}_i$  изображается диагональной матрицей с диагональными элементами равными  $N_i$ , т.е. сводится к оператору умножения:

$$\hat{b}_i^+ \hat{b}_i = N_i \,. \tag{1.13}$$

Совершенно аналогично можно убедиться, что

$$\hat{b}_i \hat{b}_i^+ = N_i + 1. \tag{1.14}$$

Разность выражений (1.14) и (1.13) даёт правило коммутации операторов уничтожения  $\hat{b}_i$  и рождения  $\hat{b}_i^+$  бозонов:

$$\hat{b}_i \hat{b}_i^+ - \hat{b}_i^+ \hat{b}_i \equiv \left| \hat{b}_i, \hat{b}_i^+ \right| = 1.$$
(1.15)

Операторы с различными индексами i и k, действуют на разные переменные  $N_i$  и  $N_k$  и коммутируют между собой:

$$\hat{b}_{i}\hat{b}_{k} - \hat{b}_{k}\hat{b}_{i} = \begin{bmatrix} \hat{b}_{i}, \hat{b}_{k} \end{bmatrix} = 0, \quad \hat{b}_{i}^{+}\hat{b}_{k}^{+} - \hat{b}_{k}^{+}\hat{b}_{i}^{+} = \begin{bmatrix} \hat{b}_{i}^{+}, \hat{b}_{k}^{+} \end{bmatrix} = 0, \\
\hat{b}_{i}\hat{b}_{k}^{+} - \hat{b}_{k}^{+}\hat{b}_{i} = \begin{bmatrix} \hat{b}_{i}, \hat{b}_{k}^{+} \end{bmatrix} = 0, \quad i \neq k.$$
(1.16)

Объединяя последнее выражение с (1.15), получим коммутационное соотношение для операторов уничтожения  $\hat{b}_i$  и рождения  $\hat{b}_i^+$  бозонов:

$$\hat{b}_{i}\hat{b}_{k}^{+} - \hat{b}_{k}^{+}\hat{b}_{i} \equiv \left[\hat{b}_{i}, \hat{b}_{k}^{+}\right] = \delta_{ik} .$$
(1.17)

Свойства операторов  $\hat{b}_i$  и  $\hat{b}_i^+$  приводят к важному результату: одночастичный оператор

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{i,k} \langle i | f^{(1)} | k \rangle \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_k$$
(1.18)

по своим матричным элементам эквивалентен оператору (1.5). Таким образом, мы выразили обычный оператор, действующий на функции координат, в виде оператора, действующего на функции чисел заполнения. В (1.18) величины  $\langle i | f^{(1)} | k \rangle$  – просто числа (1.7).

Этот результат обобщается на двухчастичные операторы

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a>b} \hat{f}^{(2)}_{ab}, \qquad (1.19)$$

где  $\hat{f}_{ab}^{(2)}$  – оператор физической величины, относящийся к двум частицам и действующий на функции от  $x_a$  и  $x_b$ . Действия с матрицами, подобные проведённым выше, приводят к выражению оператора в представлении вторичного квантования<sup>4</sup>:

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} \langle ik | f^{(2)} | lm \rangle \hat{b}_i^+ \hat{b}_k^+ \hat{b}_m \hat{b}_l , \qquad (1.20)$$

где двухчастичный матричный элемент

$$\langle ik|f^{(2)}|lm\rangle \equiv f^{(2)}_{ik,lm} = \iint \psi_i^*(x_1)\psi_k^*(x_2)\hat{f}^{(2)}\psi_l(x_1)\psi_m(x_2)dx_1dx_2 . \quad (1.21)$$

Обобщение формул (1.20) – (1.21) на симметричные многочастичные операторы  $\hat{F}^{(3)} = \sum \hat{f}^{(3)}_{abc}$  и т.д. представляется практически очевидным.

Рассмотрим гамильтониан системы N взаимодействующих бозонов:

$$\hat{H} = \sum_{a} \hat{H}_{a}^{(1)} + \sum_{a>b} U^{(2)}(x_{a}, x_{b}) + \sum_{a>b>c} U^{(3)}(x_{a}, x_{b}, x_{c}) + \dots$$
(1.22)

Здесь  $\hat{H}_a^{(1)}$  – одночастичный гамильтониан, зависящий только от координат одной частицы. Остальные члены отвечают энергии взаимодействия частиц друг с другом. Пользуясь выражениями (1.18), (1.20), получаем в представлении вторичного квантования

$$\hat{H} = \sum_{i,k} \langle i | H^{(1)} | k \rangle \hat{b}_i^+ b_k + \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} \langle ik | U^{(2)} | lm \rangle \hat{b}_i^+ \hat{b}_k^+ \hat{b}_m \hat{b}_l + \dots$$
(1.23)

Для системы невзаимодействующих бозонов в выражениях (1.22) и (1.23) остаётся только первый член. Если в качестве базисных функций  $\psi_i$  выбраны собственные функции гамильтониана  $\hat{H}^{(1)}$ , то матрица  $H_{ik}^{(1)}$  диагональна и её диагональные элементы – собственные значения энергии частиц:

$$\hat{H} = \sum_{i} \varepsilon_i \hat{b}_i^+ \hat{b}_i . \qquad (1.24)$$

Усредняя это выражение по состоянию (1.3), получим для энергии системы невзаимодействующих бозонов

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Обратите внимание на порядок индексов в этих выражениях. Пренебрежение этим обстоятельством приводит к путанице знаков при вычислениях.

$$E = \sum_{i} \varepsilon_{i} N_{i} . \tag{1.25}$$

Этот результат ещё раз раскрывает физический смысл чисел заполнения и демонстрирует простоту выкладок в представлении вторичного квантования.

Если система состоит из бозонов различного типа (например, мезоны с различными трансформационными свойствами), то для каждого типа вводятся свои операторы рождения и уничтожения, причём операторы, относящиеся к разным типам бозонов, коммутируют между собой.

2. Система фермионов, антисимметричные состояния.

Из-за принципа Паули особенность состояний Ферми-системы в том, что числа заполнения  $N_i$  могут принимать только два значения 0 или 1. Другая особенность связана с антисимметричностью волновых функций (1.4), выбором общей фазы и чётностью перестановки, связывающей два состояния частиц<sup>5</sup>.

Рассмотрим снова одночастичный оператор  $\hat{F}^{(1)}$ , выражение (1.5). Его матричные элементы также, как и для бозонов, будут отличны от нуля только для переходов без изменения всех чисел заполнения или для переходов, при которых одно из них уменьшается на единицу (становясь равным нулю), а другое увеличивается на единицу (становясь равным единице). При i < k

$$\langle N_i = 1, N_k = 0 | \hat{F}^{(1)} | N_i = 0, N_k = 1 \rangle = (-1)^{\sum (i+1,k-1)} f^{(1)}_{ik},$$
 (1.26)

где, как и для бозонов, матричный элемент

$$f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(x) \hat{f}^{(1)} \psi_k(x) dx . \qquad (1.27)$$

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Для Бозе-систем этой особенности не возникало. Выбранный знак волновой функции (1.3) сохранялся при любых перестановках частиц. Теперь нужно однозначно зафиксировать фазу в волновой функции (1.4). Для этого будем считать, что в столбцах детерминанта стоят функции в последовательности переменных  $x_1, x_2, ..., x_N$ , а строки упорядочены так, что  $p_1 < p_2 < p_3 < ... < p_N$ . Из-за антисимметричности среди чисел  $p_1, p_2, p_3, ..., p_N$  нет одинаковых, и такое упорядочение однозначно.

Символ  $\sum(l,m)$  обозначает сумму чисел заполнения всех состояний от *l*-го до *m*-го, т.е.  $\sum(l,m) = \sum_{n=l}^{m} N_n$ . Для диагональных матричных элементов сохраняется прежнее выражение (1.8).

Введем теперь операторы уничтожения  $\hat{a}_i$  и рождения  $\hat{a}_i^+$  фермионов в состоянии *i*. Для того чтобы оператор  $\hat{F}^{(1)}$  имел вид (1.18), операторы  $\hat{a}_i$  должны определяться как матрицы с элементами<sup>6</sup>:

$$\langle 0_i | \hat{a}_i | 1_i \rangle = \langle 1_i | \hat{a}_i^+ | 0_i \rangle = (-1)^{\sum (1, i-1)}.$$
 (1.28)

Перемножая эти матрицы, получим для k>i

$$\langle 1_i, 0_k | \hat{a}_i^+ \hat{a}_k | 0_i, 1_k \rangle = \langle 1_i, 0_k | \hat{a}_i^+ | 0_i, 0_k \rangle \cdot \langle 0_i, 0_k | \hat{a}_k | 0_i, 1_k \rangle =$$
  
=  $(-1)^{\sum (1, i-1)} \cdot (-1)^{\sum (1, i-1) + \sum (i+1, k-1)}$ 

или

$$\langle \mathbf{1}_{i},\mathbf{0}_{k} | \hat{a}_{i}^{\dagger} \hat{a}_{k} | \mathbf{0}_{i},\mathbf{1}_{k} \rangle = (-1)^{\sum (i+1,k-1)}.$$
 (1.29)

Если i=k, то матрица  $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$  диагональна, и её элементы равны 1 при  $N_i=1$  и нулю при  $N_i=0$ , т.е.

$$\hat{a}_{i}^{+}\hat{a}_{i} = N_{i}. \tag{1.30}$$

При подстановке этих выражений в (1.18) мы действительно получим вид (1.26).

Перемножая операторы  $\hat{a}_k$  и  $\hat{a}_i^+$ , получим

$$\langle \mathbf{1}_{i}, \mathbf{0}_{k} | \hat{a}_{k} \hat{a}_{i}^{+} | \mathbf{0}_{i}, \mathbf{1}_{k} \rangle = -(-1)^{\sum (i+1,k-1)},$$
 (1.31)

а для диагональной матрицы  $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$  -

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ = 1 - N_i \,. \tag{1.32}$$

Сравнивая выражения (1.29) и (1.31), заключаем, что  $\hat{a}_k \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_k = 0$ при  $i \neq k$ . Складывая выражения (1.30) с (1.32), получим  $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^+ = 1$ . В итоге, операторы рождения и уничтожения фермионов антикоммутируют, т.е.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Для сокращения записи значения  $N_i = 0$  и  $N_i = 1$  обозначены как  $0_i$  и  $1_i$ .

$$\hat{a}_{i}\hat{a}_{k}^{+} + \hat{a}_{k}^{+}\hat{a}_{i} = \left\{\hat{a}_{i}, \hat{a}_{k}^{+}\right\} = \delta_{ik} .$$
(1.33)

(ср. с (1.17)). Подчеркнём, что операторы рождения и уничтожения являются эрмитовски сопряжёнными друг другу.

Аналогичные вычисления дают для произведений операторов уничтожения (рождения) фермионов следующие соотношения:

$$\hat{a}_{i}\hat{a}_{k} + \hat{a}_{k}\hat{a}_{i} \equiv \{\hat{a}_{i}, \hat{a}_{k}\} = 0, \qquad \hat{a}_{i}^{+}\hat{a}_{k}^{+} + \hat{a}_{k}^{+}\hat{a}_{i}^{+} \equiv \{\hat{a}_{i}^{+}, \hat{a}_{k}^{+}\} = 0, \qquad (1.34)$$

в частности,  $\hat{a}_i \hat{a}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ = 0$ .

Все формулы (1.18–1.23) для представления операторов, полученные для бозонов, справедливы и для фермионов.

#### 3. Вакуумное состояние, алгебраический подход.

Характеризуя состояние многочастичной системы числами заполнения, независимо от статистики естественно ввести вакуумное состояние  $|0\rangle$ , когда все числа заполнения равны нулю, т.е. частиц нет вообще<sup>7</sup>. Действие оператора рождения  $\hat{c}^+_{\lambda}$  на вакуум порождает частицу в состоянии  $\lambda$ :

$$\hat{c}_{\lambda}^{+}|0\rangle = |\lambda\rangle. \tag{1.35}$$

Оператор, эрмитовски сопряжённый к  $\hat{c}_{\lambda}^{+}$ , является оператором уничтожения частицы в состоянии  $\lambda - \hat{c}_{\lambda}$ , очевидно, что

$$\hat{c}_{\lambda} |0\rangle = 0. \tag{1.36}$$

Волновая функция системы *N* тождественных частиц получается последовательным действием операторов рождения на вакуум:

$$\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N \rangle = \hat{c}^+_{\lambda_N} \cdots \hat{c}^+_{\lambda_2} \hat{c}^+_{\lambda_1} |0\rangle, \qquad (1.37)$$

а её симметрия определяется перестановочными соотношениями операторов  $\hat{c}^+_{\lambda}$ , (1.16), (1.17) для бозонов и (1.33), (1.34) для фермионов. Нормировка состояния (1.37) совпадает с нормировкой вакуумного состояния, т.е.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> Отсутствие частиц не означает отсутствия базиса, поэтому для вакуумного состояния полагаем  $\langle 0|0\rangle = 1$ .

$$\langle \lambda_N \dots \lambda_2 \lambda_1 | \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N \rangle = \langle 0 | \hat{c}_{\lambda_1} \hat{c}_{\lambda_2} \dots \hat{c}_{\lambda_N} \cdot \hat{c}_{\lambda_N}^+ \dots \hat{c}_{\lambda_2}^+ \hat{c}_{\lambda_1}^+ | 0 \rangle =$$

$$= \langle 0 | 0 \rangle = 1,$$

$$(1.38)$$

в чём можно убедиться, используя коммутационные соотношения и переводя все операторы уничтожения правее операторов рождения.

Оператор

$$\hat{n}_{\lambda} = \hat{c}_{\lambda}^{+} c_{\lambda} \tag{1.39}$$

определяет числа заполнения состояний, а оператор

$$\hat{N} = \sum_{\lambda} \hat{n}_{\lambda} \tag{1.40}$$

является оператором числа частиц, его собственное значение – полное число частиц в системе.

Коммутационные (антикоммутационные) соотношения полностью определяют алгебраические свойства операторов рождения и уничтожения<sup>8</sup>. Не останавливаясь на формальной стороне, перейдём к приложениям, которые продемонстрируют элегантность метода вторичного квантования.

#### 4. Нормальное произведение. Теорема Вика.

Нормальным произведением называется упорядоченное произведение операторов, в котором все операторы рождения стоят левее операторов уничтожения. Обозначается оно как  $N(\hat{A}\hat{B}\hat{C}...)$  или  $:\hat{A}\hat{B}\hat{C}...:$  Например, для фермионных операторов

$$N(a_{\nu}a_{\mu}a_{\rho}a_{\sigma}^{+}) = -a_{\sigma}^{+}a_{\nu}a_{\mu}a_{\rho},$$

где знак определяется чётностью перестановки операторов. Нормальное произведение имеет очень важное свойство: для него всегда

$$\left\langle 0 \left| N \left( \hat{A} \hat{B} \hat{C} \dots \right) \right| 0 \right\rangle = 0.$$
(1.41)

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> Отметим, что антикоммутирующие объекты образуют алгебру Грассмана.

Свёрткой<sup>9</sup> двух операторов называется разность их произведения и нормального произведения (с сохранением порядка операторов)

$$\hat{A}^c \hat{B}^c \equiv \hat{A}\hat{B} - N(\hat{A}\hat{B}). \tag{1.42}$$

Она является с-числом и её можно выносить из нормального произведения операторов:

$$N(\hat{A}^{c}\hat{B}^{c}\hat{C}\hat{D}) = \hat{A}^{c}\hat{B}^{c} \cdot N(\hat{C}\hat{D}),$$

$$N(\hat{A}^{c}\hat{B}\hat{C}^{c}\hat{D}) = -\hat{A}^{c}\hat{C}^{c} \cdot N(\hat{B}\hat{D})$$
(1.43)

где знак определяется чётностью перестановки операторов, чтобы установить их рядом.

Теорема Вика<sup>10</sup> утверждает, что произведение любого числа операторов равно сумме их нормального произведения, нормальных произведений с одной свёрткой всех операторов, нормальных произведений с двумя свёртками и т.д.

$$\begin{split} \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z} &= N\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\right) + N\left(\hat{A}^{c}\hat{B}^{c}\hat{C}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\right) + \ldots + \\ &+ N\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}^{c}\cdots\hat{X}^{c}\hat{Y}\hat{Z}\right) + \ldots + N\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{X}\hat{Y}^{c}\hat{Z}^{c}\right) + \ldots + \\ &+ N\left(\hat{A}^{c}\hat{B}^{c}\hat{C}\cdots\hat{X}^{d}\hat{Y}^{d}\hat{Z}\right) + \ldots + N\left(\hat{A}^{c}\hat{B}^{c}\hat{C}^{d}\cdots\hat{X}^{d}\hat{Y}^{e}\hat{Z}^{e}\right). \end{split}$$
(1.44)

Например, для двух операторов

$$\hat{A}\hat{B} = N(\hat{A}\hat{B}) + N(\hat{A}^c\hat{B}^c) = N(\hat{A}\hat{B}) + \hat{A}^c\hat{B}^c.$$

С учётом свойства (1.41) теорема Вика особенно полезна при вычислении средних значений операторов физических величин по основному состоянию системы многих частиц.

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup> В англоязычной литературе этот объект называется «contraction», в русскоязычной для него используется несколько терминов: «свёртка», «связка», «спаривание» и др. Обычно он обозначается скобкой над операторами, но учитывая трудности типографского набора, здесь используется «индексное» обозначение (парный верхний индекс).

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup> Мы имеем дело со стационарными состояниями, поэтому «хронологическое» произведение операторов  $T(\hat{A}\hat{B}\hat{C}...)$  совпадает с исходным произведением  $\hat{A}\hat{B}\hat{C}...$ 

## Глава 2. ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ – ФОКА. ЧАСТИЧНО-ДЫРОЧНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Приближение среднего поля, или модель независимых частиц, является основным в теории атома и атомного ядра. Электроны или нуклоны являются фермионами, что определяет выбор статистики в этом разделе.

В приближении независимых частиц состояние многочастичной системы характеризуется волновыми функциями отдельных частиц, движущихся в среднем поле, создаваемом всеми частицами. Этому приближению соответствует минимум функционала энергии на классе одночастичных волновых функций (1.4). Метод Хартри – Фока является универсальным «рецептом» нахождения одночастичных волновых фунций, одночастичных энергий, потенциала среднего поля и полной энергии системы при заданном взаимодействии.

В представлении вторичного квантования гамильтониан системы имеет вид (1.23). В терминах операторов рождения и уничтожения фермионов

$$H = \sum_{i,k} T_{ik} a_i^+ a_k + \frac{1}{4} \sum_{i,k,l,m} \widetilde{V}_{ik,lm} a_i^+ a_k^+ a_m a_l , \qquad (2.1)$$

где

$$T_{ik} = \int \psi_i^*(x) \hat{T}(x) \psi_k(x) dx$$
(2.2)

включает кинетическую энергию частицы и зависящие от одной координаты «внешние» поля, действующие на частицу, например центральное кулоновское поле в атоме для электронов, а

$$\widetilde{V}_{ik,lm} = \iint \psi_i^*(x_1) \psi_k^*(x_2) \widehat{V}(x_1, x_2) [\psi_l(x_1) \psi_m(x_2) - \psi_m(x_1) \psi_l(x_2)] dx_1 dx_2 \quad (2.3)$$

 антисимметризованный матричный элемент взаимодействия. В дальнейшем можно опустить «шляпки» у операторов.

Используя теорему Вика можно привести гамильтониан (2.1) к следующему виду:

$$H = \sum_{i,k} T_{ik} \left[ N(a_i^+ a_k) + a_i^{+c} a_k^c \right] + \frac{1}{4} \sum_{i,k,l,m} \widetilde{V}_{ik,lm} \left[ N(a_i^+ a_k^+ a_m a_l) + N(a_i^+ a_l) a_k^{+c} a_m^c - N(a_i^+ a_m) a_k^{+c} a_l^c + \dots \right] \cdots + a_i^{+c} a_l^c \cdot a_k^{+d} a_m^d - a_i^{+c} a_m^c \cdot a_k^{+d} a_l^d \right]$$

$$(2.4)$$

В нём исчезают все свёртки, кроме  $a_i^{+c}a_l^c$  при i = l, отвечающие заполненным состояниям, которые обозначим как  $h, h', h'', \dots$ . В результате получим

$$H = \sum_{h} T_{hh} + \frac{1}{2} \sum_{h,h'} \widetilde{V}_{hh',hh'} + \sum_{i,l} \left[ T_{il} + \sum_{h} \widetilde{V}_{ih,lh} \right] N(a_i^+ a_l) + \frac{1}{4} \sum_{i,k,l,m} \widetilde{V}_{ik,lm} N(a_i^+ a_k^+ a_m a_l).$$
(2.5)

Основное состояние системы *А* частиц в приближении среднего поля определяется как (заполненные состояния)

$$\left|\Phi\right\rangle = a_{h}^{+}a_{h'}^{+}a_{h'}^{+}\cdots a_{h_{A}}^{+}\left|0\right\rangle \tag{2.6}$$

Его нормировка совпадает с нормировкой вакуума,  $\langle \Phi | \Phi \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1$ . Полную энергию системы в основном состоянии  $E_0$  даёт соответствующее среднее значение гамильтониана (2.5), при этом все нормальные произведения вклада не дают, т.е.

$$E_0 = \left\langle \Phi \left| H \right| \Phi \right\rangle = \sum_h T_{hh} + \frac{1}{2} \sum_{h,h'} \widetilde{V}_{hh',hh'} \,. \tag{2.7}$$

Теперь можно выбрать до сих пор не определённый базис так, чтобы он диагонализировал одночастичный гамильтониан –

$$h_{ik} = T_{ik} + U_{ik} = \varepsilon_i \delta_{ik} , \qquad (2.8)$$

где  $U_{ik} = \sum_{l} \widetilde{V}_{il,kl} n_l$ . Диагональные матричные элементы  $\varepsilon_i = T_i + U_i$ 

представляют собой одночастичные энергии, а величина

$$U_i = \sum_h \tilde{V}_{ih,ih} \,. \tag{2.9}$$

является потенциалом среднего поля системы. Видно, что потенциал зависит от состояния частицы.

Уравнения (2.8) эквивалентны системе уравнений Хартри – Фока. Это приближение является самосогласованным, т.е. предполагает итерационную процедуру определения собственных значений и состояний с заданным взаимодействием V между частицами.

Отметим, что уравнения Хартри – Фока можно было бы получить непосредственно из квантового уравнения Лиувилля, описывающего эволюцию одночастичного состояния. Для стационарного случая, когда

$$a_{i}^{+}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{i}t}a_{i}^{+},$$
  

$$\varepsilon_{i}a_{i}^{+} = [H, a_{i}^{+}],$$
(2.10)

где квадратная скобка означает коммутатор (квантовая скобка Пуассона), а при его вычислении следует пользоваться антикоммутационными соотношениями (1.33) и (1.34)<sup>11</sup>.

Полную энергию системы (2.7) можно выразить через одночастичные энергии и числа заполнения (1.39):

$$E_0 = \sum_i \varepsilon_i n_i - \frac{1}{2} \sum_i U_i n_i . \qquad (2.11)$$

Важно, что полная энергия не является суммой одночастичных энергий. Числа заполнения  $n_i = 0, 1$  автоматически определяют пределы суммирования в (2.11).

Вычислим энергию отделения  $\Delta E_i = E_0(N-1) - E_0(N)$  частицы, находящейся в состоянии *i*. Если пренебречь перестройкой системы при удалении частицы, т.е. пренебречь изменением базиса,

$$\Delta E_i = -\frac{\delta E}{\delta n_i} = -\left\{ \varepsilon_i - \frac{1}{2}U_i + \sum_k \frac{\delta \varepsilon_k}{\delta n_i} n_k - \frac{1}{2}\sum_k \frac{\delta U_k}{\delta n_i} n_k \right\}.$$
 (2.12)

Учитывая определения матричных элементов, получим

$$\frac{\delta \varepsilon_k}{\delta n_i} = \frac{\delta U_k}{\delta n_i} = \tilde{V}_{ik,ik}$$
(2.13)

И

$$\sum_{k} \frac{\delta \hat{e}_{k}}{\delta n_{i}} n_{k} = U_{i} .$$
(2.14)

Таким образом,

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup> В различных подходах параметр  $\mathcal{E}_i$ , имеющий смысл одночастичной энергии, возникает по-разному. В вариационном подходе (представление Шрёдингера) это множитель Лагранжа, отвечающий сохранению нормировки волновой функции. В методе вторичного квантования  $\mathcal{E}_i$  – это собственное значение гамильтониана (2.8). Наконец, в уравнении (2.10)  $\mathcal{E}_i$  – параметр разделения переменных.

$$\Delta E_i = -\varepsilon_i \,. \tag{2.15}$$

Последнее равенство составляет содержание теоремы Купманса. Она связывает одночастичную энергию в среднем поле с экспериментально определимой энергией отделения частицы и очень полезна в приложениях.

Если основное состояние системы в приближении Хартри – Фока найдено, то можно построить различные частично-дырочные возбуждённые состояния системы с заданным числом частиц A, см. рис.1. Совокупность таких состояний,  $|1p,1h\rangle$ ,  $|2p,2h\rangle$  и т.д., вместе с основным состоянием  $|\Phi\rangle$  образуют полный набор, и любое состояние системы может быть представлено в виде разложения по этому набору<sup>12</sup>:

$$\left|\Psi\right\rangle = C_{0}\left|\Phi\right\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} C_{n}\left|np,nh\right\rangle$$
(2.16)

при условии, что  $\sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 = 1$ . Так как средняя энергия состояний  $|np,nh\rangle$ 

растёт при увеличении n, можно ожидать, что коэффициенты  $C_n$  убывают, и ограничиться конечным числом конфигураций,  $n \le N$ .



Рис.1. Частично-дырочные конфигурации.

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup> Частично-дырочное представление наглядно иллюстрируется диаграммной техникой, но здесь мы не будем на этом останавливаться.

Для определения коэффициентов *С<sub>n</sub>* следует решить систему линейных уравнений:

$$\sum_{m=0}^{N} (H_{nm} - E\delta_{nm}) C_m = 0, \quad n = 0, 1, \dots N, \quad (2.17)$$

где  $H_{nm} = \langle np, nh | H | mp, mh \rangle$ . Очевидно, что если матрица  $H_{nm}$  диагональна,  $C_0 = 1$  и остальные коэффициенты равны нулю. Если ограничиться только состояниями  $|1p,1h\rangle$  (*N*=1), то возможны два решения:  $C_0 = 1$ ,  $C_1 = 0$  и  $C_0 = 0$ ,  $C_1 = 1$ . Первое соответствует основному хартри-фоковскому состоянию, второе – возбуждённому частично-дырочному. Таким образом, смешивания этих состояний не происходит (нулевые блоки на рис.2). Это утверждение носит название теоремы Бриллюэна. Отметим, что если включить в рассмотрение 2p,2h-конфигурации, то поскольку  $H_{02} \neq 0$  эти состояния уже смогут смешиваться с основным состоянием.

	Основное состояние	1p	1р,1 <i>h</i> -состояния			2 <i>p</i> ,2 <i>h</i> -состояния	
Основное состояние	$E_0$	0	0	0	$V_{02}$	V' <sub>02</sub>	
1 <i>р</i> ,1 <i>h</i> - состояния	0	$E_{ph}$	$V_{ph,p'h'}$	$V_{ph,p}$ , $h$	$V_{12}$	V' <sub>12</sub>	
	0	$V_{p'h',ph}$	$E_{p'h}$	$V_{p'h',p''h''}$			
	0	$V_{p''h'',ph}$	$V_{p''h'',p'h'}$	$E_{p}$ $h$			
2p, 2h-	$V_{20}$	$V_{21}$			$E_{pp,hh^{\cdot}}$	$V_{22}$	
состояния	V'20	V'21			$V_{22}$	$E_{pp}$ ", $_{hh}$ "	

Puc.2. Схематическое представление секулярной матрицы для частично-дырочных возбуждений.

Остановимся на развитии частично-дырочного формализма, который может быть применён для описания возбуждённых состояний ядер с заполненными оболочками. Структура секулярной матрицы уравнения (2.17) показана на рис.2.

Можно полагать, что энергия состояний  $|2p,2h\rangle$  существенно больше энергии состояний  $|1p,1h\rangle$ , и они мало смешиваются. Действительно, среднее значение энергии 1p,1h-конфигурации в околомагических ядрах составляет примерно 10 МэВ, а матричный

элемент взаимодействия – 1 МэВ. Приближение, в котором не учитываются конфигурации с двумя частицами и двумя дырками называется приближением Тамма – Данкова, на рис.2 соответствующая часть матрицы выделена тоном<sup>13</sup>.

Если представить эффективное частично-дырочное взаимодействие в сепарабельном виде, т.е. положить

$$\left\langle ph|V|p'h'\right\rangle = -\chi D_{ph} D_{p'h'}^*, \qquad (2.18)$$

секулярное уравнение (2.17) в приближении Тамма – Данкова можно записать в виде

$$\left(E - \varepsilon_{ph}\right) X_{ph} = -\chi D_{ph} \sum_{p'h'} D_{p'h'}^* X_{p'h'}, \qquad (2.19)$$

где  $\varepsilon_{ph} = \varepsilon_p - \varepsilon_h$  – энергия невозмущённой частично-дырочной конфигурации, а суммирование проводится по всем таким конфигурациям. Решение (2.19) для частично-дырочных амплитуд –

$$X_{ph} = N \cdot \frac{D_{ph}}{\varepsilon_{ph} - E}, \qquad (2.20)$$

N-нормировочная константа, определяемая из условия  $\sum_{ph} \left| X_{ph} \right|^2$ . После

умножения обеих частей (2.19) на  $D_{ph}^*$  и соответствующего суммирования,

$$\sum_{ph} D_{ph}^* X_{ph} = -\chi \sum_{ph} \frac{\left| D_{ph} \right|^2}{E - \varepsilon_{ph}} \cdot \sum_{p'h'} D_{p'h'}^* X_{p'h'}, \qquad (2.21)$$

получается дисперсионное соотношение для энергии Е:

$$\frac{1}{\chi} = \sum_{ph} \frac{\left| D_{ph} \right|^2}{\varepsilon_{ph} - E}.$$
(2.22)

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup> При проведении оболочечных расчётов часто идут более прагматичным путём. В базис для диагонализации включаются все частично-дырочные кофигурации с энергией, не превышающей некоторого заданного значения. В таком случае 2p, 2h- и более высокие конфигурации мало влияют на перестройку основного состояния, но важны при смешивании различных 1p, 1h-конфигураций между собой.

Энергии *E* состояний системы с взаимодействием определяются точками пересечения прямой  $\chi^{-1}$  и графиком правой части, имеющей полюса при невозмущённых энергиях частично-дырочных конфигураций, как это показано на рис.3.



Рис.3. Дисперсионный график для энергии системы с сепарабельным взаимодействием в приближении Тамма – Данкова.

Для вырожденного случая, когда  $\varepsilon_{ph} = \varepsilon$ , все состояния системы вырождены,  $E = \varepsilon$ , кроме одного –

$$E = \varepsilon - \chi \sum_{ph} \left| D_{ph} \right|^2.$$
(2.23)

Для притягательного частично-дырочного взаимодействия ( $\chi > 0$ ) оно имеет энергию *E*, значительно меньшую энергии  $\varepsilon$  любого частично-дырочного состояния. Такое состояние является когерентной суперпозицией многих частично-дырочных конфигураций.

Принципиально, что основным состоянием в приближении Тамма – Данкова остаётся основное состояние Хартри – Фока. Регулярный метод учёта конфигураций с двумя частицами и двумя дырками (приближение случайных фаз), в котором меняется структура основного состояния, будет рассмотрен ниже.

## Глава 3. МЕТОД ПРОИЗВОДЯЩИХ ФУНКЦИОНАЛОВ В ТЕОРИИ МНОГИХ ТЕЛ

Состояния системы n частиц описываются волновыми функциями f с суммируемым квадратом от переменных  $x_1, x_2, ..., x_n$ . Для них определено скалярное произведение

$$(f_1, f_2) = \int f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \overline{f_2(x_1, x_2, \dots, x_n)} Dx$$
, (3.1)

где  $Dx = dx_1 dx_2 \cdots dx_n$ . Для статистики Бозе – Эйнштейна пространство состояний состоит из симметричных функций, для статистики Ферми – Дирака – из антисимметричных. В случае квантового поля  $\varphi(x)$  аргумент рассматривается как непрерывный индекс. Поле  $\varphi$  является либо комплекснозначной функцией, либо образующей грассмановой алгебры. Учитывая приложения в теории ядра, остановимся, в первую очередь, на антикоммутирующих полях.

Набор конечного числа попарно антикоммутирующих объектов  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  образует конечномерную грассманову алгебру, которая определяется как совокупность полиномов, построенных из образующих полей  $\varphi$ . Число независимых мономов  $\varphi_i \varphi_k \cdots \varphi_m$  конечно, любые поскольку два монома, отличающиеся перестановкой множителей, совпадают с точностью до знака, и ни один из мономов не может содержать какую-либо образующую дважды. Старший моном – произведение образующих. Bce нечётные всех мономы антикоммутируют между собой, а чётные коммутируют с любыми другими.

Полное число всех независимых мономов, включая единицу, равно  $2^n$ , т.е. грассманова алгебра с *n* образующими представляет собой конечномерное пространство размерностью  $2^n$  и её общий элемент может быть записан в виде линейной комбинации

$$f(\varphi) = f_0 + \sum_i f_1(i)\varphi_i + \sum_{i < k} f_2(i,k)\varphi_i\varphi_k + \dots$$
(3.2)

с произвольными числовыми коэффициентами.

Для грассмановой алгебры вводится понятие функциональной производной по  $\varphi_i$ :

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_i}\varphi_1\varphi_2\cdots\varphi_n = \delta_{i1}\varphi_2\cdots\varphi_n - \delta_{i2}\varphi_1\varphi_3\cdots\varphi_n + \ldots + (-1)^{n-1}\delta_{in}\varphi_1\cdots\varphi_{n-1}.$$
 (3.3)

Действие производной  $\partial/\partial \varphi_i$  на произвольный моном определяется следующим образом. Если моном не содержит  $\varphi_i$ , то результат равен 0. Если  $\varphi_i$  есть в составе монома (и при том только один), то его нужно перевести в крайнее левое положение и затем вычеркнуть<sup>14</sup>. Очевидно, функциональные производные антикоммутируют между собой.

Правила функционального дифференцирования совершенно аналогичны стандартным, но требуют внимания к порядку элементов.

Пусть 
$$\varphi_i = \sum_k a_{ik} \psi_k$$
,  $f(\varphi) = f(\varphi(\psi))$ , тогда  
 $\frac{\delta}{\delta \psi_k} f(\varphi(\psi)) = \sum_i a_{ik} \left[ \frac{\delta}{\delta \varphi_i} f(\varphi) \right]_{\varphi = \varphi(\psi)}.$ 
(3.4.1)

Если t – вещественный параметр,  $\varphi_i(t) = \sum_k a_{ik}(t) \psi_k$ , тогда

$$\frac{d}{dt}f(\varphi(t)) = \sum_{i} \frac{d\varphi_{i}}{dt} \frac{\delta}{\delta\varphi_{i}} f = \sum_{i} \left(f \frac{\delta}{\delta\varphi_{i}}\right) \frac{d\varphi_{i}}{dt}.$$
(3.4.2)

Пусть  $f_1$  – чётный элемент грассмановой алгебры (его разложение содержит только мономы чётной степени, он коммутирует с любым другим элементом), а  $f_2$  – произвольный, тогда

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_i}(f_1f_2) = \left(\frac{\delta}{\delta\varphi_i}f_1\right)f_2 + f_1\left(\frac{\delta}{\delta\varphi_i}f_2\right). \tag{3.4.3}$$

Если  $f_1$  – нечётный элемент, а  $f_2$  – произвольный, то

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_i}(f_1f_2) = \left(\frac{\delta}{\delta\varphi_i}f_1\right)f_2 - f_1\left(\frac{\delta}{\delta\varphi_i}f_2\right).$$
(3.4.4)

Вариационные производные антикоммутируют между собой:

 $^{14}$  Различают функциональные производные, действующие направо:  $\frac{ec{\delta}}{\delta \! arphi} f(\! arphi \! )$  и

налево:  $f(\varphi)\frac{\bar{\delta}}{\delta\varphi}$ . Действие последней требует перестановки образующих в мономе в крайнее правое положение и в остальном совершенно аналогично.

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_i} \left( \frac{\delta}{\delta\varphi_k} f \right) = -\frac{\delta}{\delta\varphi_k} \left( \frac{\delta}{\delta\varphi_i} f \right).$$
(3.5)

Пусть  $\varphi(x)$  и A(x) – пара антикоммутирующих (в том числе и между собой) полей<sup>15</sup>, тогда справедливы следующие равенства:

$$\exp(-\varphi A)F\left(\frac{\delta}{\delta\varphi}\right)\exp(\varphi A) = F\left(A + \frac{\delta}{\delta\varphi}\right),\tag{3.6}$$

$$\exp\left(A\frac{\delta}{\delta\varphi}\right)F(\varphi) = F(\varphi + A). \tag{3.7}$$

Здесь и далее используется сокращённая запись:

$$\varphi A \equiv \int dx \varphi(x) A(x),$$
$$A \frac{\delta}{\delta \varphi} \equiv \int dx A(x) \frac{\delta}{\delta \varphi(x)}$$

Из равенства (3.6) имеем

$$F\left(\frac{\delta}{\delta\varphi}\right)\exp\varphi A = F(A)\exp(\varphi A).$$
(3.8)

Выражения (3.6–3.8) являются непосредственными обобщениями обычных правил действия с вариационными производными.

На конечномерной грассмановой алгебре с образующими  $\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_n$  функциональный интеграл<sup>16</sup> определяется как линейный функционал I(f) на пространстве функций (3.2), заданный следующими соотношениями:

$$I(\varphi_i, \varphi_k, ..., \varphi_m) = 0 \quad при \ m < n,$$
  

$$I(\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_n) = (2\pi)^{-n/2}.$$
(3.9)

<sup>15</sup> Отметим, что операция  $\frac{\delta}{\delta \varphi}$  антикоммутирует с *A*.

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup> В математике эти интегралы называются континуальными (бесконечномерные в функциональном пространстве), в физике – интегралами по траекториям. Важное свойство этих интегралов в том, что если подинтегральное выражение представляет собой экспоненту, зависящую от траектории в степени не выше второй, то можно получить их значение с точностью, может быть, до некоторых простых множителей.

Если записывать символ I(f) в виде  $\int D\varphi f(\varphi)$  и понимать его как повторный интеграл ( $D\varphi \equiv D\varphi_n \cdots D\varphi_1$ ), то определение (3.9) можно переформулировать в виде следующего правила вычисления однократных интегралов для каждой образующей  $\varphi_i$ :

$$\int D\varphi_i = 0, \qquad \int D\varphi_i \varphi_i = (2\pi)^{-1/2}. \tag{3.10}$$

Символы  $D(\varphi_i)$  антикоммутируют как друг с другом, так и с образующими  $\varphi_k$  при  $k \neq i$ . Из определений (3.9), (3.10) следует, что

$$\int D\varphi \left(\frac{\delta}{\delta \varphi_i} f(\varphi)\right) = 0, \qquad (3.11)$$

т.к. вклад в интеграл даёт лишь старший моном  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ , которого заведомо нет в производной  $\delta f / \delta \varphi_i$ .

При линейной замене переменных в интеграле  $\varphi = L\psi$ , где L – невырожденная матрица,

$$\int D\varphi f(\varphi) = \int JD\psi f(L\psi), \qquad (3.12)$$

где  $J = \det L^{-1}$ , т.е. роль якобиана на грассмановой алгебре играет обратный определитель.

Пусть  $\varphi \equiv \varphi_1, ..., \varphi_n$  и  $a \equiv a_1, ..., a_n$  – полный набор образующих грассмановой алгебры, т.е. все  $\varphi_i$  и  $a_k$  попарно антикоммутируют. Пользуясь определениями интеграла, можно показать, что

$$\int D\varphi f(\varphi) = \int D\varphi f(x+a), \qquad (3.13)$$

следовательно  $D\varphi = D(\varphi + a)$ , т.е. функциональные интегралы на грассмановой алгебре инвариантны относительно трансляций переменных. Прямое и обратное преобразование Фурье на грассмановой алгебре –

$$F(a) = \int D\varphi f(\varphi) e^{i\varphi a},$$

$$f(\varphi) = (2\pi)^n \int Da F(a) e^{-i\varphi a}.$$
(3.14)

Если первое равенство является определением функции F(a), то второе можно доказать при *n* нечётном, а  $f(\varphi)$  состоит только из чётных мономов.

Наиболее интересные функциональные интегралы – гауссовы. Рассмотрим

$$I(K,a) \equiv \int D\varphi \exp\left\{\frac{1}{2}\varphi K\varphi + \varphi a\right\}$$
(3.15)

на конечномерной грассмановой алгебре с образующими  $\varphi \equiv \varphi_1, ..., \varphi_n$  и  $a \equiv a_1, ..., a_n$ , считаем *n* чётным, а *K* – антисимметричная невырожденная матрица.

После преобразования  $\varphi = \varphi' - K^{-1}a$ , используя свойство трансляции (3.13), антисимметричность *K* и равенство  $\varphi a = -a\varphi$ , получаем

$$I(K,a) = I(K,0) \exp\left\{\frac{1}{2}aK^{-1}a\right\}.$$
 (3.16)

После замены  $\varphi = L\psi$ , при которой  $K \to K' = L^T KL$ , причём K' – квазидиагональная матрица, составленная из *m* двумерных блоков (n=2m) вида  $\begin{pmatrix} 0 & \lambda_i \\ -\lambda_i & 0 \end{pmatrix}$ , а det L=1, получаем свойство I(K,0)=I(K',0),

причём

$$\exp\left\{\frac{1}{2}\varphi K'\varphi\right\} = \prod_{k=1}^{m} \exp(\lambda_k \varphi_{2k-1} \varphi_{2k}) = \prod_{k=1}^{m} (1 + \lambda_k \varphi_{2k-1} \varphi_{2k}).$$
(3.17)

Вклад в интеграл по  $\varphi$  даёт лишь произведение вторых слагаемых в каждой скобке, следовательно

$$I(K,0) = (2\pi)^{-m} \prod_{k=1}^{m} \lambda_k = \varepsilon \det\left(\frac{K}{2\pi}\right)^{1/2}, \qquad (3.18)$$

где  $\varepsilon = \pm 1$  знаковый множитель, отличающий пфаффиан<sup>17</sup> матрицы К от det  $K^{1/2}$ .

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup> Пфаффианом кососимметричной матрицы называется некоторый многочлен от её элементов, квадрат которого равен определителю этой матрицы. Например,  $Pf\begin{bmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{bmatrix} = a$ .

Формулы (3.16), (3.18) обобщаются на бесконечномерный случай (все фермионные поля – комплексные, поэтому их размерность можно считать чётной):

$$\int D\varphi \exp\left\{\frac{1}{2}\varphi K\varphi + \varphi A\right\} = \varepsilon \det\left(\frac{K}{2\pi}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{1}{2}AK^{-1}A\right\}.$$
(3.19)

Символ  $\int D\varphi$  понимается как интеграл по некоторому линейному пространству функций,  $\varphi K \varphi$  – невырожденная квадратичная форма на этом пространстве,  $\varphi A \equiv \int dx \varphi(x) A(x)$  – линейная форма, функция *A* играет роль параметра.

Определители линейных операций вычисляют с помощью формулы Indet K = Spln K. (3.20) Если K = 1 + M, то логарифм операции K можно разложить в ряд:  $M - M^2/2 + M^3/3 - ...$  След общего члена этого ряда можно вычислить, если M – линейная интегральная операция с известным ядром M(x, x'). Произведению операций соответствует свёртка ядер, след линейной интегральной операции с ядром L(x, x') равен  $\int dx L(x, x)$ .

При вычислении определителей также может быть полезна формула

$$\frac{d}{d\lambda}\operatorname{Spln}(K-\lambda U) = -\operatorname{Sp}U(K-\lambda U)^{-1}, \qquad (3.21)$$

в которой  $\lambda$  – число, U – некоторая операция, которую желательно выбрать так, чтобы можно было найти явно ядро операции  $(K - \lambda U)^{-1}$ (при U = 1 это резольвента K), а по нему – правую часть (3.21). Вычислив затем первообразную правой части, находим  $\operatorname{Spln}(K - \lambda U) = \operatorname{Indet}(K - \lambda U)$  с точностью до не зависящей от  $\lambda$ аддитивной постоянной, чего обычно бывает достаточно.

Формула (3.19) рассматривается как определение функционального гауссова интеграла. Не претендуя на математическую строгость, можно обращаться с функциональными интегралами как с хорошо сходящимися обычными интегралами: замена переменных, дифференцирование по параметру. Таким путём можно получать замкнутые выражения, которые в теории возмущений получаются с помощью суммирования бесконечных рядов. Ниже приводятся примеры такого применения функциональных методов в теории ядра.

#### Глава 4. ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ СВЕРХТЕКУЧЕГО ТИПА

Уравнения сверхтекучей модели ядра могут быть получены разными способами: вариационным методом, методом функций Грина, методом обобщённой матрицы плотности или их многочисленными модификациями. Здесь используется метод канонического преобразования (вторичного квантования).

Основное состояние чётно-чётного ядра определяется как вакуум квазичастиц,  $\alpha_k |0\rangle = 0$ , соответствующих каноническому преобразованию:

$$\alpha_{i}^{+} = \sum_{\lambda} \left( u_{i\lambda} a_{\lambda}^{+} + v_{i\lambda} a_{\lambda} \right)$$

$$\alpha_{i} = \sum_{\lambda} \left( u_{i\lambda}^{*} a_{\lambda} + v_{i\lambda}^{*} a_{\lambda}^{+} \right)$$
(4.1)

Преобразование  $a \rightarrow \alpha$  называется каноническим потому, что оно сохраняет антикоммутационные соотношения операторов рождения и уничтожения квазичастиц:

$$\begin{cases}
\alpha_i^+, \alpha_k \\
= \delta_{ik}, \\
\alpha_i^-, \alpha_k^+ \\
= 0.
\end{cases}$$
(4.2)

Из этих соотношений следуют условия ортонормировки *u*,*v*-амплитуд в (4.1):

$$\sum_{\lambda} (u_{i\lambda}u_{k\lambda} + v_{i\lambda}v_{k\lambda}) = \delta_{ik},$$

$$\sum_{\lambda} (u_{i\lambda}v_{k\lambda} + v_{i\lambda}u_{k\lambda}) = 0.$$
(4.3)

Обратное преобразование к одночастичным операторам  $\alpha \to a$  обеспечивает справедливость условий полноты для *u*,*v*-амплитуд:

$$\sum_{i} (u_{i\lambda}u_{i\lambda'} + v_{i\lambda}v_{i\lambda'}) = \delta_{\lambda\lambda'},$$

$$\sum_{i} (u_{i\lambda}v_{i\lambda'} + v_{i\lambda}u_{i\lambda'}) = 0.$$
(4.4)

Гамильтониан (2.1) в терминах квазичастиц можно записать в схематическом виде:

$$H = H_{00} + H_{11} + H_{20} + H_{02} + H_{22} + H_{31} + H_{13} + H_{40} + H_{04}, \qquad (4.5)$$

где, в частности,

$$H_{00} = \sum_{\lambda\lambda'} \left[ \left( T_{\lambda\lambda'} + \frac{1}{2} U_{\lambda\lambda'} \right) \rho_{\lambda\lambda'} + \frac{1}{2} \Delta_{\lambda\lambda'} \chi^*_{\lambda'\lambda} \right], \tag{4.6.1}$$

$$H_{11} = \sum_{ik} \sum_{\lambda\lambda'} \left[ h_{\lambda\lambda'} \left( u_{i\lambda}^* u_{k\lambda'} - v_{k\lambda} v_{i\lambda'}^* \right) + \Delta_{\lambda\lambda'} u_{i\lambda}^* v_{k\lambda'} + \Delta_{\lambda\lambda'}^* u_{k\lambda} v_{i\lambda'}^* \right] \alpha_i^+ \alpha_k ,$$

$$(4.6.2)$$

$$H_{20} = \sum_{ik} \sum_{\lambda\lambda'} \left[ h_{\lambda\lambda'} u_{i\lambda}^* v_{k\lambda'}^* + \frac{1}{2} \left( u_{i\lambda}^* u_{k\lambda'}^* \Delta_{\lambda\lambda'} - v_{i\lambda}^* v_{k\lambda'}^* \Delta_{\lambda\lambda'}^* \right) \right] \alpha_i^+ \alpha_k^+, \qquad (4.6.3)$$

$$H_{02} = \sum_{ik} \sum_{\lambda\lambda'} \left[ h_{\lambda\lambda'} v_{i\lambda} u_{k\lambda'} + \frac{1}{2} \left( v_{i\lambda} v_{k\lambda'} \Delta_{\lambda\lambda'} - u_{i\lambda} u_{k\lambda'} \Delta_{\lambda\lambda'}^* \right) \right] \alpha_i \alpha_k .$$
(4.6.4)

Здесь введены матрица плотности

$$\rho_{\lambda\lambda'} = \sum_{k} v_{k\lambda} v_{k\lambda'} , \qquad (4.7)$$

тензор спаривания

$$\chi_{\lambda\lambda'} = \frac{1}{2} \sum_{k} \left( u_{k\lambda} v_{k\lambda'} - v_{k\lambda} u_{k\lambda'} \right), \tag{4.8}$$

потенциал среднего поля

$$U_{\lambda\lambda'} = \sum_{\nu\nu'} V^{\omega}_{\lambda\nu,\lambda'\nu'} \rho_{\nu\nu'}, \qquad (4.9)$$

одночастичный гамильтониан

$$h_{\lambda\lambda'} = T_{\lambda\lambda'} + U_{\lambda\lambda'} \tag{4.10}$$

и поле спаривания

$$\Delta_{\lambda\lambda'} = -\frac{1}{4} \sum_{\nu\nu'} V_{\lambda\lambda',\nu\nu'}^{\xi} \sum_{k} \left( u_{k\nu} v_{k\nu'} - v_{k\nu} u_{k\nu'} \right).$$
(4.11)

Линеаризованное уравнение движения

$$E_n \alpha_n^+ = \left[ H, \alpha_n^+ \right] \tag{4.12}$$

приводит к системе уравнений Хартри – Фока – Боголюбова

$$E_{k}u_{k\lambda} = \sum_{\lambda'} \left\{ (h_{\lambda\lambda'} - \mu\delta_{\lambda\lambda'})u_{k\lambda'} + \Delta_{\lambda\lambda'}v_{k\lambda'} \right\}$$
  
$$- E_{k}v_{k\lambda} = \sum_{\lambda'} \left\{ (h_{\lambda\lambda'} - \mu\delta_{\lambda\lambda'})v_{k\lambda'} + \Delta_{\lambda\lambda'}u_{k\lambda'} \right\}$$
  
(4.13)

для определения квазичастичных амплитуд  $u_{n\lambda}$ ,  $v_{n\lambda}$  и энергий  $E_n$  в модели независимых квазичастиц. В этом приближении «работает» только член  $H_{11} = \sum_n E_n \alpha_n^+ \alpha_n$ , а  $H_{20} = H_{02} = 0$  («компенсация опасных

диаграмм»), части гамильтониана в (4.5) с четырьмя операторами опущены. К их роли мы вернёмся в следующем разделе.

В теории ядра при рассмотрении парных корреляций сверхтекучего типа различают эффективные взаимодействия в канале «частица-дырка»  $V^{\emptyset}$  (4.9) и «частица-частица»  $V^{\xi}$  (4.11). Эти взаимодействия рассматриваются как независимые величины, определённые в различных областях импульсов взаимодействующих частиц. Первое взаимодействие определяется при нулевом переданном импульсе. Второе, соответственно, при нулевом суммарном импульсе частиц. Взаимодействие в канале «частица-дырка» использовалось выше, в задаче о среднем поле (метод Хартри – Фока) и частично-дырочных возбуждениях ядер.

С каноническим представлением тесно связан специальный выбор взаимодействия  $V^{\xi}$  – так называемое константное спаривание. Если ограничиться рассмотрением в (4.11) только «диагональных» парных матричных элементов  $V_{\lambda\bar{\lambda},\nu\bar{\nu}}^{\xi}$ , отражающих взаимодействия между частицами, находящимися в сопряжённых по времени состояниях с нулевым суммарным импульсом, то поле спаривания также становится «диагональным»  $\Delta_{\alpha\alpha'} = \Delta_{\alpha\bar{\alpha}} \delta_{\alpha'\bar{\alpha}}$  <sup>18</sup>. В этом случае состояния квазичастиц характеризуются квантовыми числами одночастичных орбит, а индекс *k* совпадает с  $\lambda$ . Далее, все «диагональные» матричные элементы можно считать одинаковыми, т.е. положить, что

$$V_{\lambda\lambda',\nu\nu'}^{\xi} = -G\delta_{\lambda'\bar{\lambda}}\delta_{\nu'\bar{\nu}}, \qquad (4.14)$$

где *G* – константы, подбираемые для нейтронов и протонов поотдельности. Такое приближение получило большое распространение

 $^{18}$ Свойство *T*-сопряжения  $\hat{T} \big| \overline{\alpha} \big\rangle = - \big| \alpha \big\rangle$  и антисимметричность поля спаривания

<sup>(4.11)</sup> приводят к *Т*-чётности поля спаривания в каноническом представлении. Теорема Таулеса гарантирует существования представления, в котором поле спаривания становится «диагональным».

из-за своей замечательной простоты. Оно передаёт основные черты короткодействующего парного взаимодействия и привело к успешному развитию сверхтекучей модели ядра<sup>19</sup>.

В этом приближении система уравнений (4.13) в представлении, где  $h_{\lambda\lambda'} = e_{\lambda} \delta_{\lambda\lambda'}$ , переходит в так называемое уравнение парных корреляций с постоянным полем спаривания  $\Delta$ :

$$2(e_{\lambda}-\mu)u_{\lambda}v_{\lambda}-\Delta\left(u_{\lambda}^{2}-v_{\lambda}^{2}\right)=0, \qquad (4.15)$$

решения которого, с учётом нормировки  $u_{\lambda}^2 + v_{\lambda}^2 = 1$ , хорошо известны:

$$u_{\lambda}^{2} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{e_{\lambda} - \mu}{E_{\lambda}} \right),$$
  

$$v_{\lambda}^{2} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{e_{\lambda} - \mu}{E_{\lambda}} \right),$$
(4.16)

где квазичастичная энергия

$$E_{\lambda} = \sqrt{\left(e_{\lambda} - \mu\right)^2 + \Delta^2} \ . \tag{4.17}$$

Условие согласования (4.11) в приближении константного спаривания переходит в уравнение для определения этой постоянной для каждого сорта частиц:

$$\Delta = G \sum_{\lambda} u_{\lambda} v_{\lambda} \,. \tag{4.18}$$

Рассмотрим волновую функцию основного состояния в приближении Хартри-Фока-Боголюбова. Она определяется как вакуум квазичастиц:  $\alpha_k |0\rangle = 0$ . В терминах одночастичных операторов её можно искать в следующем виде:

$$\left|0\right\rangle = \left(x + \sum_{\lambda} x_{\lambda} a_{\lambda}^{+} + \sum_{\lambda \lambda'} x_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{+} a_{\lambda'}^{+} + \dots\right) \left|0\right\rangle_{0} = f\left(a^{+}\right) \left|0\right\rangle_{0}, \qquad (4.19)$$

где x,  $x_{\lambda}$ ,  $x_{\lambda\lambda'}$  – неизвестные коэффициенты, а  $|0\rangle_0$  – одночастичный вакуум,  $a_{\lambda}|0\rangle_0 = 0$ .

<sup>&</sup>lt;sup>19</sup> Целью данного пособия было продемонстрировать применение метода вторичного квантования для получения основных уравнений теории. Мы не останавливаемся на применении теории к описанию ядерных свойств, отсылая читателя к учебникам и специальной литературе по ядерной физике.

Используя определение функциональной производной (3.3), для векторов состояний можно перейти от операторов уничтожения к производной  $a \rightarrow \delta/\delta a^+$  и записать, что

$$a_{\lambda}a_{\nu_{1}}^{+}a_{\nu_{2}}^{+}\cdots a_{\nu_{n}}^{+}|0\rangle_{0} = \frac{\delta}{\delta a_{\lambda}^{+}}a_{\nu_{1}}^{+}a_{\nu_{2}}^{+}\cdots a_{\nu_{n}}^{+}|0\rangle_{0}, \qquad (4.20)$$

Это приводит к дифференциальному уравнению для определения искомой функции *f* в (4.19). Действительно,

$$\begin{aligned} \alpha_{k}|0\rangle &= \sum_{\lambda} \left( u_{k\lambda}a_{\lambda} + v_{k\lambda}a_{\lambda}^{+} \right) f\left(a^{+}\right) 0 \rangle_{0} = \\ &= \sum_{\lambda} \left( u_{k\lambda}\frac{\delta}{\delta a_{\lambda}^{+}} + v_{k\lambda}a_{\lambda}^{+} \right) f\left(a^{+}\right) 0 \rangle_{0} = 0. \end{aligned}$$

$$(4.21)$$

Формальное решение последнего уравнения имеет вид

$$f(a^{+}) = N \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} W_{\lambda\lambda'} a^{+}_{\lambda} a^{+}_{\lambda'}\right), \qquad (4.22)$$

где антисимметричная матрица W определяется u, v-амплитудами<sup>20</sup>:

$$W_{\lambda\lambda'} = \sum_{k} \left( u^{-1} \right)_{\lambda k} v_{k\lambda'} .$$
(4.23)

Окончательно -

$$\left|0\right\rangle = N \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} W_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'}^{\dagger}\right) \left|0\right\rangle_{0}.$$
(4.24)

Экспоненциальный вид волновой функции вакуума квазичастиц в терминах операторов рождения составляет содержание теоремы Таулеса.

Для вычисления нормировочной константы N в (4.24) рассмотрим скалярное произведение или интеграл перекрытия между основными состояниями систем, отличающихся каким-либо параметром, числом частиц, например, или полным угловым моментом,

<sup>20</sup> Матрица  $u^{-1}$  является обратной к матрице u. В приближении константного спаривания  $(u^{-1})_{\lambda k} = \frac{\delta_{\lambda k}}{u_{\lambda}}$ .

$$Z_{21} = \langle 0_2 | 0_1 \rangle = N_1 N_{20} \langle 0 | \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(2)} a_\lambda a_{\lambda'}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(1)} a_\lambda^+ a_{\lambda'}^+\right) | 0 \rangle_0.$$

$$(4.25)$$

Используя формулу (4.20), заменяем операторы уничтожения функциональными производными, тогда для среднего значения (4.25) получаем

$$Z_{21} = N_1 N_2 \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(2)} \frac{\delta}{\delta a_{\lambda}^+} \frac{\delta}{\delta a_{\lambda'}^+}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(1)} a_{\lambda}^+ a_{\lambda'}^+\right) \Big|_{\left\{a_{\lambda}^+\right\} = 0}$$
(4.26)

или в символическом виде -

$$Z_{21} = N_1 N_2 \exp\left(\frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta a^+} W_2 \frac{\delta}{\delta a^+}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} a^+ W_1 a^+\right) \bigg|_{a^+ = 0}.$$
 (4.27)

Воспользуемся представлением гауссова функционального интеграла:

$$\int D\varphi \exp\left\{-\frac{1}{2}\varphi A\varphi + \varphi a + F(\varphi)\right\} =$$

$$= \det A^{1/2} \exp\left\{F\left(\frac{\delta}{\delta a}\right)\right\} \exp\left(-\frac{1}{2}aA^{-1}a\right),$$
(4.28)

где *F* – некоторая функция. Тогда

$$Z_{21} = N_1 N_2 \det W_1^{1/2} \int D\varphi \exp\left(-\frac{1}{2}\varphi W_1^{-1}\varphi + \varphi a^+ + \frac{1}{2}\varphi W_2\varphi\right)\Big|_{a^+=0}.$$
 (4.29)

Обратный переход, согласно (4.28) после приведения подобных, даёт:

$$Z_{21} = N_1 N_2 \det W_1^{1/2} \det \left( W_1^{-1} - W_2 \right)^{1/2} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} a^+ \left( W_1^{-1} - W_2 \right)^{-1} a^+ \right\} \Big|_{a^+ = 0} = N_1 N_2 \det \left( I - W_1 W_2 \right)^{1/2},$$
(4.30)

где *I* – единичная матрица, а матрицы *W* составлены из *u*, *v*-амплитуд (4.23). Использование формулы (4.28) в обе стороны позволило опустить в её правой части несущественный здесь числовой множитель.

Нормировочный множитель N в (4.24) получается из условия  $Z_{11} = \langle 0 | 0 \rangle = 1$ .

Метод производящих функционалов особенно эффективен при вычислении матричных элементов переходов между различными ядерными состояниями. Рассмотрим матричный элемент оператора

 $T = \sum_{\lambda\lambda'} T_{\lambda\lambda'} a_{\lambda} a_{\lambda'}$  передачи двух частиц между основными состояниями

соседних чётно-чётных ядер. Воспользуемся при этом явным видом волновой функции (4.24):

$$\bar{T}_{21} = \langle 0_2 | \bar{T} | 0_1 \rangle = N_1 N_{20} \langle 0 | \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(2)} a_\lambda a_{\lambda'} \right\} \times$$

$$\times \sum_{\nu \nu'} T_{\nu \nu'} a_\nu a_{\nu'} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(1)} a_\lambda^+ a_{\lambda'}^+ \right\} | 0 \rangle_0$$

$$(4.31)$$

или в символическом виде -

$$\bar{T}_{21} = N_1 N_{20} \langle 0 | \exp\left\{\frac{1}{2}aW_2a\right\} (aTa) \exp\left\{-\frac{1}{2}a^+ W_1a^+\right\} | 0 \rangle_0. \quad (4.32)$$

Вынесем матрицу *T* из-под знака матричного элемента, для этого введём параметр *x*:

$$\bar{T}_{21} = N_1 N_2 \frac{\delta}{\delta x} T \frac{\delta}{\delta x_0} \langle 0 | \exp\left\{\frac{1}{2}aW_2a + xa\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2}a^+ W_1a^+\right\} |0\rangle_0 \Big|_{x=0}.$$
(4.33)

Теперь опять воспользуемся формулой (4.20) и заменим операторы *а* производными  $\frac{\delta}{\delta a^+}$ , как в (4.26):

Две экспоненты здесь можно представить в виде гауссова интеграла (4.28), который после приведения подобных вычисляется. В результате получим

$$\bar{T}_{21} = N_1 N_2 \det \left( I - W_1 W_2 \right)^{1/2} \frac{\delta}{\delta x} T \frac{\delta}{\delta x} \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{2} x \left( W_1^{-1} - W_2 \right)^{-1} x \right] \right\} \Big|_{x=0}.$$
(4.35)

После дифференцирования по параметру, принимая во внимание, что для любой матрицы R справедливо равенство  $\frac{\delta}{\delta x}T\frac{\delta}{\delta x}\exp\left\{-\frac{1}{2}xRx\right\} = -\operatorname{Sp}TR$ , можно продолжить:

$$\bar{T}_{21} = -N_1 N_2 \det \left( I - W_1 W_2 \right)^{1/2} \operatorname{Sp} \left[ T \left( W_1^{-1} - W_2 \right)^{-1} \right]$$
(4.36)

или окончательно -

$$\bar{T}_{21} = -N_1 N_2 \det(I - W_1 W_2)^{1/2} \operatorname{Sp} \left[ T W_1 (I - W_1 W_2)^{-1} \right].$$
(4.37)

Матричный элемент сопряжённого оператора  $\stackrel{+}{T} = \begin{pmatrix} -\\ T \end{pmatrix}^{-}$ 

$${}^{+}_{T_{21}} = -N_1 N_2 \det (I - W_2 W_1)^{1/2} \operatorname{Sp} \left[ T W_2 (I - W_2 W_1)^{-1} \right].$$
(4.38)

Совершенно аналогично вычисляются матричные элементы частично-дырочных операторов  $M = \sum_{\lambda \lambda'} M_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{+} a_{\lambda'}$ :

$$M_{21} = \langle 0_2 | M | 0_1 \rangle = N_1 N_{20} \langle 0 | \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(2)} a_\lambda a_{\lambda'}\right\} \times \\ \times \sum_{\nu \nu'} M_{\nu \nu'} a_{\nu}^+ a_{\nu'} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} W_{\lambda \lambda'}^{(2)} a_\lambda^+ a_{\lambda'}^+\right\} | 0 \rangle_0.$$

$$(4.39)$$

Единственное отличие от (4.31) состоит в том, что в операторе перехода следует заменить оператор  $a^+$  на производную  $\frac{\delta}{\delta a}$  и подействовать ею налево:

$$M_{21} = N_1 N_{20} \langle 0 | \exp\left\{\frac{1}{2} a W_2 a\right\} a W_2 M a \exp\left\{-\frac{1}{2} a^+ W_1 a^+\right\} | 0 \rangle_0 =$$

$$= N_1 N_{20} \langle 0 | \exp\left\{\frac{1}{2} a W_2 a\right\} a \tilde{M} a \exp\left\{-\frac{1}{2} a^+ W_1 a^+\right\} | 0 \rangle_0,$$
(4.40)

где  $\tilde{M} = \frac{1}{2} (W_2 M + M^T W_2)$ , а  $M^T$  – транспонированная матрица. Окончательно –

$$M_{21} = -\frac{1}{2}N_1N_2 \det(I - W_1W_2)^{1/2} \operatorname{Sp}\left[(I - W_1W_2)^{-1}W_1(W_2M + M^TW_2)\right]. (4.41)$$

Знак матричных элементов не существенен для вычислений и отражает неопределённость в выборе знака det  $W^{1/2}$ .

Полученные здесь выражения (4.37), (4.38) и (4.41) позволяют рассчитывать матричные элементы переходов с учётом изменений свойств основных состояний ядер. Оператор передачи двух частиц связывает состояния соседних чётно-чётных ядер, отличающиеся числом частиц. В этом случае исследование спектроскопических факторов реакций двухчастичных передач позволяет получать спектроскопическую информацию, которая терялась при усреднённом подходе.

В кренкинг-модели ядра состояния основной вращательной полосы считаются вакуумом квазичастиц, они отличаются от основного состояния только значением углового момента. Изменения в числах заполнения с ростом углового момента отражаются на матричных элементах E2-переходов между вращательными состояниями. Формула (4.41) передаёт эти изменения и позволяет проводить количественное сравнение рассчитанных вероятностей E2-переходов с экспериментальными данными.

## Глава 5. ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ФАЗ В ТЕОРИИ ЯДРА

Описание ядерных возбуждений в приближении случайных фаз эквивалентно введению новых квазичастиц – фононов. Оно является микроскопическим аналогом феноменологического представления о низколежащих возбуждённых состояниях ядра, как о независимых гармонических колебаниях. Этому этапу описания ядерных возбуждений соответствует переход в гамильтониане ядра от операторов квазичастиц (4.1) к операторам фононов:

$$Q_{n}^{+} = N_{n} \sum_{ik} \left[ x_{ik}^{(n)} \alpha_{i}^{+} \alpha_{k}^{+} + y_{ik}^{(n)} \alpha_{i} \alpha_{k} \right],$$
(5.1)

где  $x^{(n)}$  и  $y^{(n)}$  – антисимметричные амплитуды, с которыми двухквазичастичные возбуждения формируют фонон,  $N_n$  – нормировочная константа. Оператор уничтожения фононов определяется как эрмитовски сопряжённый –  $Q_n = (Q_n^+)^+$ .

Основное состояние ядра  $|0\rangle\rangle$  определяется теперь как вакуум фононов,  $Q_n|0\rangle\rangle = 0$ . Согласно теореме Таулеса его явный вид может быть получен аналогично вакууму квазичастиц (4.19), (4.23):

$$\left|0\right\rangle\right\rangle = N_0 e^{-\hat{Z}} \left|0\right\rangle,\tag{5.2}$$

где матрица  $\hat{Z} = \frac{1}{2} \sum_{ik} Z_{ik} \alpha_i^+ \alpha_k^+$  определяется коэффициентами *x*, *y* в

(5.1). Для дальнейшего он не существенен, но важно установить, что вакуум фононов является теперь суперпозицией частично-дырочных возбуждений кратных 2*n*, как это показано на рис.4. Принципиальным отличием приближения случайных фаз от приближения Тамма – Данкова является перестройка основного состояния. Теперь оно не является вакуумом частично-дырочных возбуждений, а является суперпозицией вакуума квазичастиц и двухквазичастичных конфигураций и учитывает более сложные корреляции в движении частиц (см. ниже).

Строго говоря, двухквазичастичные операторы фононов (5.1) не являются бозонными операторами. Однако можно положить, что усреднение по основному состоянию их коммутаторов приведёт к каноническим выражениям для статистики Бозе. При этом мы должны будем пренебречь большим числом малых компонент с «хаотическим» распределением знаков. Приравнивание нулю среднего значения всех этих компонент и дало название этому приближению – «метод случайных фаз».



Рис.4. Частично-дырочная структура основного состояния в приближении случайных фаз.

Здесь мы воспользуемся другим подходом, основанном на методе вторичного квантования, и получим основные уравнения приближения случайных фаз для микроскопического описания низколежащих ядерных возбуждений коллективной природы. Положим, что фононные операторы (5.1) удовлетворяют бозонным коммутационным соотношениям<sup>21</sup>:

$$\begin{bmatrix} Q_n, Q_m^+ \end{bmatrix} = \delta_{nm},$$

$$\begin{bmatrix} Q_n, Q_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_n^+, Q_m^+ \end{bmatrix} = 0.$$
(5.3)

Уравнения движения можно получить из уравнения Лиувилля в гармоническом приближении –

$$\left[H, Q_n^+\right] = \omega_n Q_n^+, \tag{5.4}$$

<sup>&</sup>lt;sup>21</sup> Этот метод иногда называют «квазибозонным» приближением. Его развитием является представление парных фермионных операторов в виде ряда по степеням бозонных, реализованное в модели «взаимодействующих бозонов».

которое приводит к однородной системе уравнений

$$E_{ik}^{\pm(n)} + \sum_{lm} \vec{F}_{ik,lm}^{\pm(n)} z_{lm} = \omega_n z_{ik}^{\pm(n)}$$
(5.5)

 $_{+}(n)$ 

для определения энергий возбуждения фононов  $\omega_n$  и амплитуд  $z_{ik}$ , связанных с амплитудами из (5.1):

$$x_{ik}^{(n)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +(n) & -(n) \\ z_{ik} + z_{ik} \end{pmatrix},$$
  
$$y_{ik}^{(n)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +(n) & -(n) \\ z_{ik} - z_{ik} \end{pmatrix}.$$
  
(5.6)

В (5.5)  $E_{ik} = E_i + E_k$  – энергия возбуждения двух квазичастиц. При вычислении коммутатора в (5.4) гамильтониан *H* должен быть взят в квазичастичном представлении (4.5), а оператор  $O^+$  в виде (5.1).

В системе уравнений (5.5) эффективные взаимодействия<sup>22</sup> в канале «частица-дырка»  $V^{\emptyset}$  и в канале «частица-частица»  $V^{\xi}$  образуют матричные элементы

$$\stackrel{\pm}{F}_{ik,lm} = \sum_{\lambda\lambda',\nu\nu'} \left\{ \begin{array}{l} \left( u_{i\lambda}v_{k\lambda'} \pm v_{i\lambda}u_{k\lambda'} \right)^{\pm} V_{\lambda\nu',\lambda'\nu}^{\omega} \left( u_{l\nu}v_{m\nu'} \pm v_{l\nu}u_{m\nu'} \right) + \\ + \frac{1}{2} \left( u_{i\lambda}u_{k\lambda'} \pm v_{i\lambda}v_{k\lambda'} \right) V_{\lambda\lambda',\nu\nu'}^{\xi} \left( u_{l\nu}u_{m\nu'} \pm v_{l\nu}v_{m\nu'} \right) \right\}, \quad (5.7)$$

где *и*- и *v*-коэффициенты определяются уравнениями Хартри – Фока – Боголюбова (4.13) сверхтекучей модели ядра.

График решений системы уравнений (5.5) подобен графику, представленному на рис.3 для решений секулярного уравнения в приближении Тамма – Данкова. Для притягательного взаимодействия характерно решение с энергией меньше наименьшего двухквазичастичного полюса. Это решение отличается большой степенью когерентного смешивания многих двухквазичастичных

<sup>&</sup>lt;sup>22</sup> Рассматриваемые независимо эти взаимодействия приводят к разным ветвям ядерного возбуждения, наблюдаемым экспериментально.

конфигураций. Остальные решения находятся между двухквазичастиными полюсами:  $\omega_1 < \min\{E_{ik}\} < \omega_2 < \ldots < \max\{E_{ik}\}$ .

Энергия основного состояния в приближении случайных фаз –

$$E_0 = \left\langle \left\langle 0 \left| H \right| 0 \right\rangle \right\rangle. \tag{5.8}$$

Возбуждённые (однофононные) ядерные состояния

$$\left|n\right\rangle\right\rangle = Q_{n}^{+}\left|0\right\rangle\right\rangle \tag{5.9}$$

являются суперпозициями двухквазичастичных состояний, их энергия –  $E_0 + \omega_n$ , т.к.

$$HQ_n^+|0\rangle\rangle = \left[H, Q_n^+\right]0\rangle\rangle + Q_n^+H|0\rangle\rangle = (E_0 + \omega_n)Q_n^+|0\rangle\rangle.$$
(5.10)

Энергия основного состояния системы в приближении случайных фаз всегда меньше энергии в квазичастичном приближении, которая в свою очередь меньше энергии основного состояния системы независимых частиц:

$$\langle \langle 0|H|0\rangle \rangle < \langle 0|H|0\rangle < {}_0 \langle 0|H|0\rangle_0.$$

Это отражает последовательный учёт более высоких корреляций и усложнение вида волновой функции на каждом этапе<sup>23</sup>.

«Идеализированные» коммутационные соотношения (5.3) приводят к простым условиям ортонормировки амплитуд:

$$\sum_{ik} \begin{cases} +(p)_{-}(q)_{-}(p)_{+}(q) \\ z_{ik} & z_{ik} - z_{ik} & z_{ik} \end{cases} = 0,$$

$$\sum_{ik} \begin{cases} +(p)_{-}(q)_{-}(p)_{+}(q) \\ z_{ik} & z_{ik} + z_{ik} & z_{ik} \end{cases} = \delta_{pq}$$
(5.11)

и позволяют вычислить нормировочную константу:

$$N_n = \left\{ 2\sum_{ik}^{+(n)} \frac{z_{ik}}{z_{ik}} \right\}^{-1/2}.$$
(5.12)

$$_{\pm}(n)$$

Амплитуды *z*<sub>*ik*</sub> определяют изменения матрицы плотности:

<sup>&</sup>lt;sup>23</sup> Отметим, что, в отличие от первых двух приближений, уравнения метода случайных фаз не следуют из вариационного принципа.

и тензора спаривания (добавление или вычитание двух частиц, соответственно):

$$\delta \overset{\pm}{\chi}^{(n)}_{\lambda\lambda'} = \mp N_n \sum_{ik} \left\{ \left( u_{i\lambda} u_{k\lambda'} + v_{i\lambda} v_{k\lambda'} \right)^{+} z_{ik}^{(n)} \mp \left( u_{i\lambda} u_{k\lambda'} - v_{i\lambda} v_{k\lambda'} \right)^{-} z_{ik}^{(n)} \right\}$$
(5.14)

при переходе ядра из основного состояния в однофононное возбуждённое состояние с энергией  $\omega_n$ .

Рассмотрим вид частично-дырочного оператора перехода в приближении случайных фаз:

$$M = \sum_{\lambda\lambda'} M_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^{+} a_{\lambda'} = \sum_{ik} \left[ M_{ik}^{(1)} \alpha_{i}^{+} \alpha_{k}^{+} + M_{ik}^{(2)} \alpha_{i} \alpha_{k} \right].$$
(5.15)

Его матричный элемент между основным  $|0\rangle\rangle$  и возбуждённым однофононным состоянием (5.9) -

$$\left\langle \left\langle 0 \middle| M \middle| n \right\rangle \right\rangle = \left\langle \left\langle 0 \middle| \left[ M, Q_n^+ \right] 0 \right\rangle \right\rangle = N_n \sum_{ik} \left[ \frac{-(n) + (n)}{M_{ik} z_{ik} + M_{ik} z_{ik}} \right], \quad (5.16)$$

 $\overset{\pm}{M}_{ik} = -\sum_{\substack{j,j'}} \overset{\mp}{M}_{\lambda\lambda'} \Big( u_{i\lambda} v_{k\lambda'} \pm v_{i\lambda} u_{k\lambda'} \Big), \quad \mathbf{a} \qquad \overset{\pm}{M}_{\lambda\lambda'} = \frac{1}{2} \Big( M_{\lambda\lambda'} \pm M_{\lambda'\lambda} \Big).$ где

Совершенно аналогично выводятся формулы для операторов передачи двух частиц (канал «частица-частица»).

При самосогласованном подходе к описанию возбуждённых состояний существование в спектре возбуждений «духовых» состояний приводит ни к каким физическим следствиям из-за их ортогональности ко всем реальным состояниям. Для доказательства этого рассмотрим возможное изменение числа частиц в ядре при возбуждении

$$\delta N^{(n)} = \sum_{\lambda} \delta \rho_{\lambda\lambda}^{(n)} .$$
(5.17)

Очевидно, что здесь работает только симметричная часть переходной (n)

матрицы плотности (5.13), пропорциональная амплитуде *z* . Величина

$$\overline{n_{ik}} = \sum_{\lambda} \left( u_{i\lambda} v_{k\lambda} - v_{i\lambda} u_{k\lambda} \right)$$
(5.18)

является решением системы (5.5), отвечающим  $\omega = 0$ . Действительно, т.к. справедливы равенства

$$E_{ik} n_{ik} = -2\sum_{\lambda\lambda'} \Delta_{\lambda\lambda'} \left( u_{i\lambda} u_{k\lambda'} + v_{i\lambda} v_{k\lambda'} \right), \qquad (5.19.1)$$

$$\sum_{ik} \bar{n}_{ik} \left( u_{i\lambda} v_{k\lambda'} + v_{i\lambda} u_{k\lambda'} \right) = 0, \qquad (5.19.2)$$

$$\sum_{ik} \bar{n}_{ik} \left( u_{i\lambda} u_{k\lambda'} + v_{i\lambda} v_{k\lambda'} \right) = -\sum_{i} \left( u_{i\lambda} v_{i\lambda'} - v_{i\lambda} u_{i\lambda'} \right), \quad (5.19.3)$$

то при подстановке  $z_{ik} = n_{ik}$  в систему (5.5) она удовлетворяется. Ортогональность собственных векторов, отвечающих разным собственным числам, приводит к тому, что

$$\delta N^{(n)} = \sum_{ik} \bar{n}_{ik} z_{ik} = 0$$
(5.20)

при любом *n*.

Таким образом, хотя основное состояние ядра на квазичастичной сталии характеризуется только средним числом частиц. его возбуждённые состояния ортогональны ко всем состояниям с другим числом частиц, т.е. не содержат «духовых» компонент. Это результат самосогласованного рассмотрения спаривания, т.к. в равенствах (5.19) существенно использованы уравнения Хартри – Фока – Боголюбова согласования (4.11) для (4.13) и условие поля спаривания, определяющие квазичастичные характеристики ядра в основном состоянии. Совершенно аналогично доказывается отделение «духовых» компонент в волновых функциях возбуждённых состояний в случае восстановления трансляционной и ротационной инвариантности.

В теории ядра широко используются правила сумм. Для одночастичного оператора (1.5) они определяются как энергетически взвешенные моменты:

$$S_k \equiv \sum_i \left( E_i - E_0 \right)^k \left| \left\langle i \left| F \right| 0 \right\rangle \right|^2, \qquad (5.21)$$

где под  $|i\rangle$  понимается полный набор состояний системы с гамильтонианом *H* и энергиями  $E_i$ ;  $E_0$  – энергия основного состояния. Используя условия полноты, правило сумм можно переписать в следующем виде:

$$S_k = \langle 0 | F (H - E_0)^k F | 0 \rangle, \qquad (5.22)$$

который позволяет получить оценки глобальных ядерных свойств без привлечения сложных вычислений. Здесь мы используем правила сумм для изучения различных приближений в теории ядра и сравнения результатов микроскопических и феноменологических подходов.

Определим «энергии»

$$\varepsilon_k = \left(S_k / S_{k-2}\right)^{1/2},\tag{5.23}$$

которые характеризуют распределение (5.21). Если оно имеет вид острого пика, то все  $\varepsilon_k$  совпадают, степень их несовпадения отражает ширину энергетического распределения. Неравенство Шварца для моментов  $S_{k+2} \cdot S_k \ge S_{k+1} \cdot S_{k+1}$  приводит к условию

$$\varepsilon_{-1} \le \varepsilon_0 \le \varepsilon_1 \le \overline{E} \equiv \frac{S_1}{S_0} \le \varepsilon_2 \le \dots$$
 (5.24)

и позволяет оценить среднеквадратичные флуктуации распределения относительно средней энергии:

$$\rho^{2} \equiv \varepsilon_{2}^{2} - \overline{E}^{2} \le \frac{1}{4} \left( \varepsilon_{3}^{2} - \varepsilon_{1}^{2} \right).$$
(5.25)

Наиболее интересным является правило сумм  $S_1$ . Оно может быть выражено через двойной коммутатор:

$$S_{1} = \sum_{i} \left( E_{i} - E_{0} \right) \left\langle i \left| F \right| 0 \right\rangle \right|^{2} = \frac{1}{2} \left\langle 0 \left[ \left[ F, \left[ H, F \right] \right] \right] 0 \right\rangle$$
(5.26)

и содержит набор «точных» собственных состояний гамильтониана H. Использование приближённых (модельных) значений  $|i\rangle$  и  $E_i$  в (5.26) позволяет судить об адекватности приближения по точности выполнения последнего равенства. В частности, в приближении Тамма – Данкова нарушается правило сумм  $S_1$ , но сохраняется  $S_0$ , которое нарушается в приближении случайных фаз. В приближении независимых частиц в среднем поле удовлетворяются оба этих правила сумм.

#### ЛИТЕРАТУРА

- Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962 – 446 с.
- 2. **Фейнман Р., Хибс А.** Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: 1968 384 с.
- 3. Березин Ф.А. Метод вторичного квантования. М.: «Наука», 1965 236 с.
- 4. **Айзенберг И., Грайнер В.** Микроскопическая теория ядра. М.: Атомиздат, 1976 – 488 с.
- 5. Бор О., Моттельсон Б. Структура атомного ядра. Т.1. М.: «Мир», 1971 456 с.
- 6. Васильев А.Н. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1976 295 с.
- 7. **Киржниц Д.А.** Полевые методы теории многих частиц. М.: Госатомиздат, 1963 344 с.
- 8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: «Наука», 1974 – 752 с.
- 9. Мигдал А.Б. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. М.: «Наука», 1983 432 с.
- 10. **Нгуен Ван Хьеу.** Основы метода вторичного квантования. М.: Энергоатомиздат, 1984 208 с.
- 11. Таулес Д. Квантовая механика систем многих частиц. М.: «Мир», 1975 379 с.
- 12. **Ring P., Schuck P.** The Nuclear Many-Body Problem. N.Y., Springer-Verlag, 1980 716 p.