第 21 卷 第 3 期　　物 理 学 报　　Vol. 21, No. 3
1965 年 3 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　March, 1965

研 究 简 报

变分法与无規及高阶无規位相近似法 II*

吴 式 樞
（吉 林 大 学 物 理 系）

我們将尽可能援引前一文[1]的符号. 为了求解以下 Schrödinger 方程:

$$\mathbf{H}\Psi = (\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1)\Psi = E\Psi, \tag{1}$$

文献[1]中曾指出,代替通常的組态混合法 (OCMM)[1], 将綫型变分函数选如

$$\Psi = \mathscr{A}\Psi_0 = \sum_{i=1}^{\mu} C_i \mathscr{A}_i \Psi_0 \tag{2}$$

是有益的,式(2)中 Ψ_0 表示一恰当选择的、有满或稳定半满壳粒子数的体系的严格基态波函数. 变分 C_i 可立即求得, E 与 C_i 应满足以下方程:

$$\sum_i (H_{ji} - E\Delta_{ji})C_i = 0, \tag{3}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} H_{ji} &= \langle\Psi_0|\mathscr{A}_j^{+}\mathbf{H}\mathscr{A}_i|\Psi_0\rangle, \\ \Delta_{ji} &= \langle\Psi_0|\mathscr{A}_j^{+}\mathscr{A}_i|\Psi_0\rangle. \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

以后式(3)将称为推广的組态混合法 (GCMM) 的本征方程. 文献[1]中曾闡明,我們恆可按以下要求

$$\Delta_{ji} = \langle\Psi_0|\mathscr{A}_j^{+}\mathscr{A}_i|\Psi_0\rangle = \Delta_{jj}\delta_{ji} \tag{5}$$

选择 $\mathscr{A}_i$, 应用以下关系:

$$[\mathbf{H}, \mathscr{A}_i] \simeq \sum_j X_{ji}\mathscr{A}_j \tag{6}$$

及 $\mathbf{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0$ 与

$$\mathscr{A}_j^{+}\mathbf{H}\mathscr{A}_i = \mathscr{A}_j^{+}[\mathbf{H}, \mathscr{A}_i] + \mathscr{A}_j^{+}\mathscr{A}_i\mathbf{H}, \tag{7}$$

我們有

$$H_{ji} \simeq (X_{ji} + E_0\delta_{ji})\Delta_{jj}, \tag{8}$$

将上式与式(5)代入式(3)所得近似本征方程即为无規与高阶无規位相 (RP-HRP) 近似的本征方程;这說明, RP-HRP 近似法实质上只是 GCMM 的一个近似. 矩陣 $\mathscr{H} = \{H_{ji}\}$ 是厄米的, 但当 $\mathscr{A} = \sum_i C_i\mathscr{A}_i$ 中含有反向項时, RP-HRP 近似法中的久期矩陣 $\mathbf{X}=$

---

* 1964 年 8 月 3 日收到.

1) OCMM 中所用线型变分函数为 $\Phi = \sum_{i=1}^{\nu} C_i\mathscr{A}_i\Phi_0$, 其中 Φ_0 为 Ψ_0 的零级近似. 如 Ψ 中含有反向项, 令 $\mathscr{A}_k$ 表示对应于反向项的算符, 因 $\mathscr{A}_k\Phi_0 = 0$, 故这时 $\nu \neq \mu$.

$\{X_{ji}\}$ 却不是厄米的，即 X_{ji} 旣不滿足 $X_{ji}=X_{ij}^*$，也不滿足 $\Delta_{jj}X_{ji}=\Delta_{ii}X_{ij}^*$，后者似应认为是 RP-HRP 近似法的一个缺点．文献[1]中曾因此提出另一个近似計算 H_{ji} 的方法，这方法虽使由式(3)所得近似本征方程具有厄米性，但所得 $\mathscr{H}$ 的非对角元，即 $H_{ji}(j\neq i)$ 的近似表达式却不及由 RP-HRP 近似法，即由式(8)所得的准确．这篇短文的第一个目的在于指出，实际上我們还存有一个很簡单的、近似計算 H_{ji} 的方法，这方法不仅可使由式(3)所得近似本征方程具有厄米性，且由此所得 H_{ji} 的近似表达式和式(8)同样准确．我們注意，代替式(7)，$\mathscr{A}_j^\dagger\mathbf{H}\mathscr{A}_i$ 也可写如下形式：

$$\mathscr{A}_j^\dagger\mathbf{H}\mathscr{A}_i=\frac{1}{2}\{[\mathscr{A}_j^\dagger,\mathbf{H}]\mathscr{A}_i+\mathscr{A}_j^\dagger[\mathbf{H},\mathscr{A}_i]+\mathbf{H}\mathscr{A}_j^\dagger\mathscr{A}_i+\mathscr{A}_j^\dagger\mathscr{A}_i\mathbf{H}\},\tag{9}$$

以上式及式(5)与式(6)代入式(4)，并注意到 $[\mathscr{A}_j^\dagger,\mathbf{H}]=[\mathbf{H},\mathscr{A}_j]^+$，我們有

$$H_{ji}\simeq\frac{1}{2}(\Delta_{jj}X_{ji}+\Delta_{ii}X_{ij}^*)+E_0\Delta_{jj}\delta_{ji}\equiv K_{ji}.\tag{10}$$

以式(10)代入式(3)，我們得到

$$\sum_i(K_{ji}-E\Delta_{ji})C_i=0.\tag{11}$$

显然式(10)与式(8)同样准确，即有相同的近似程度．此外容易看出，矩陣 $\mathbf{K}=\{K_{ji}\}$ 是厄米的；这說明式(11)有可能比按 RP-HRP 近似法所得的本征方程优越．K_{ji} 与 Δ_{ji} 都仍是粒子填充数 n_r 的函数．为了确定 n_r，我們依然可用文献[1]中提出的另一变分法，只是应用后者以确定 n_r 的計算工作量一般較大．我們已經看到，不論是 RP-HRP 近似法还是式(11)，都可由式(3)通过对 H_{ji} 进行近似計算而达到；这告訴我們，如果 H_{ji} 与 Δ_{ji} 計算得愈准确，則由式(3)所得式(1)的近似解将愈准确．本文的第二个目的在于指明，我們的确还存有两个可以更准确地計算 H_{ji} 与 Δ_{ji} 的途径．

途径(1)　这一点几乎是显然的：倘对問題涉及到的 $\mathbf{H}_1$, Brueckner-Goldstone 相連項展开公式（BGLCE）收斂，我們可应用 BGLCE 計算 Ψ_0，从而求得 H_{ji} 与 Δ_{ji}.

途径(2)　我們可应用 Green 函数方法計算 H_{ji} 与 Δ_{ji}．令 $\mathscr{A}_i(t)$ 与 $\mathscr{A}_j^\dagger(t)$ 分別表示 $\mathscr{A}_i$ 与 $\mathscr{A}_j^\dagger$ 在 Heisenberg 表象中的表示式，即

$$\mathscr{A}_i(t)=e^{i\mathbf{H}t}\mathscr{A}_ie^{-i\mathbf{H}t},\quad\mathscr{A}_j^\dagger(t)=e^{i\mathbf{H}t}\mathscr{A}_j^\dagger e^{-i\mathbf{H}t},\tag{12}$$

引入以下函数：

$$\Delta_{ji}(\tau=t_1-t_2)=\langle\Psi_0|T\{\mathscr{A}_j^\dagger(t_1)\mathscr{A}_i(t_2)\}|\Psi_0\rangle,\tag{13}$$

式中 T 表 Wick 时間排列符号．显然我們首先有

$$\Delta_{ji}=\langle\Psi_0|\mathscr{A}_j^\dagger\mathscr{A}_i|\Psi_0\rangle=\lim_{\tau\to0^+}\Delta_{ji}(\tau),\tag{14}$$

其次因 $\partial\mathscr{A}_i(t)/\partial t=i[\mathbf{H},\mathscr{A}_i(t)]$，我們还有

$$\langle\Psi_0|\mathscr{A}_j^\dagger[\mathbf{H},\mathscr{A}_i]|\Psi_0\rangle=\lim_{t_1\to t_2+}\frac{1}{i}\langle\Psi_0|T\{\mathscr{A}_j^\dagger(t_1)\frac{\partial}{\partial t_2}\mathscr{A}_i(t_2)\}|\Psi_0\rangle=$$

$$=i\lim_{\tau\to0+}\left\{\frac{\partial}{\partial\tau}\Delta_{ji}(\tau)\right\}.\tag{15}$$

注意，由式(7)有以下关系：

$$H_{ji}=\langle\Psi_0|\mathscr{A}_j^\dagger[\mathbf{H},\mathscr{A}_i]|\Psi_0\rangle+E_0\Delta_{ji},\tag{16}$$

式(14)，(15)与(16)告訴我們，求 H_{ji} 与 Δ_{ji} 可归結为求 $\Delta_{ji}(\tau)$．令 $\mathfrak{N}=\sum_r\xi_r^\dagger\xi_r$ 表总粒

子数算符，因 $[\mathbf{H}, \mathfrak{N}] = 0$，$\mathscr{A}_j^\dagger \mathscr{A}_i$ 中所含粒子产生与消灭算符的个数必互相相等，按定义，函数 $\Delta_{ji}(\tau)$ 就是一个双时間的多个粒子 Green 函数[2]. 如 $\mathbf{H}$ 为 BCS 型的模型哈密頓量，这时 $[\mathbf{H}, \mathfrak{N}] \neq 0$，$\mathscr{A}_j^\dagger \mathscr{A}_i$ 中所含粒子产生与消灭算符的个数不一定互相相等，在后一情况，$\Delta_{ji}(\tau)$ 为一推广的双时 Green 函数，亦称为双时多綫 Green 函数[3]. 以上結果表明，所有計算 Green 函数的方法都可用来計算 H_{ji} 与 Δ_{ji}. 例如，倘攝动理論适用，我們有

$$
\begin{aligned}
\Delta_{ji}(\tau) &= \frac{\langle \Phi_0 | T\{S \mathscr{A}_j^\dagger(t_1) \mathscr{A}_i(t_2)\} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S | \Phi_0 \rangle} = \\
&= \langle \Phi_0 | T\{S \mathscr{A}_j^\dagger(t_1) \mathscr{A}_i(t_2)\} | \Phi_0 \rangle_L, \qquad (17)
\end{aligned}
$$

式(17)中算符所用表象現都是相互作用表象，$S = U(\infty, -\infty)$ 是熟知的 S 矩陣，Φ_0 表示 Ψ_0 的零級近似，足标 L 表示我們只对相連图求和而且所定义的眞空情态为 Φ_0. 我們注意，如以式(17)代入式(14)，(15)与(16)，这时所得結果将概括由途径 (1) 得到的結果，卽途径(1)实质上只是途径(2)的一个特例.

参 考 文 献

[1] 吳式枢，物理学报，**21**(1965)，12.

[2] Thouless, D. J., The Quantum Mechanics of Many-Body Systems (Academic Press, New York and London, 1961), ch. v.

[3] Kobe, D. H. and Cheston, W. B., *Ann. Phys.* (N. Y.), **20** (1962), 279.