

研究簡報

关于量子統計力学中的集团展式方法*

陶 云
(复旦大学)

一、引言

李政道和楊振宁^[1]从統計物理的一般原理出发,应用类似于經典情况下集团展式的方法,建立了处理量子体系的一般方法。这种方法有别于近来广泛被采用的場論方法,前者純粹运用統計物理的思想。这种近似方法,对处理短程相互作用的低密度体系比較有利,例如他們用来討論硬球的玻色气体^[2]及其相变問題^[3]。最近莫林^[4]发展了这种方法,并用来討論短程的費米气体^[5]和核物質的一些性質^[6]。但这种方法有它的局限性,它只能处理平衡态的热力学性質,无法描写体系的动力学行为、不能討論体系的各种質粒子激发譜(象单粒子激发和各种集体激发等)特别是它們的衰滅。对于长程相互作用(象庫仑相互作用)的体系,这种近似方法实际上无效。

在討論低密度短程相互作用的費米体系的平衡态性質时,这种方法的优点似乎在于各类图形和密度的依賴关系特別明显,而且图形中的頂角函数計算也較方便,往往只需取 S 分波就够了,对奇性相互作用情况也不会发生困难。用这种方法所得的图形中,只出現一种綫,这种綫所帶的因子直接与粒子的动量分布函数相对应,因此图形中綫的数目的多少直接反映了密度次幂的高低,結果对低密度体系,主要貢獻来自內綫較少的图形。这一点和費曼图形方法^[7](零温极限可參閱文献[8])不同,后者的图形中明显地区分出粒子綫和“空穴綫”,而直接与密度有关的是空穴綫,图形中二种綫的混合出現,使密度的依賴性較为复杂,这是不足之处;同时按相互作用傅里叶分量展开的費曼图形方法中,在奇异相互作用情况下,每項是发散的,所以必須設法改善,例如把无穷項的梯字图形加起来才避免了这个困难,但这种困难在李、楊的方法中根本不发生,因为它是按照二体碰撞元展开的。

二、集团展式方法的引述

对于 N 个粒子体系的哈密頓,記为

$$\hat{H}_N = - \sum_{i=1}^N \hat{\nabla}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \hat{v}_{ij}, \quad (1)$$

这里 $\hat{\nabla}_i^2$ 是拉普拉斯算符, $\hat{v}_{ij}$ 是第 i 个粒子和第 j 个粒子間的相互作用势能,这里还采取 $\hbar = 1, 2m = 1$ 的单位。体系平衡态的热力学性質可由热力学势 Ω 决定, Ω 定义为

* 1962年10月5日收到;1963年3月30日收到修改稿。

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \{ \text{Sp } e^{\nu \hat{N} - \beta \hat{H}} \} = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ \sum_{Nn} e^{\nu N - \beta E_{Nn}} \right\}, \quad (2)$$

这里 $\beta = 1/kT$ 是倒温度, $\hat{N}$ 是粒子数算符, E_{Nn} 是 $\hat{H}_N$ 的第 n 个本征值. 令

$$\hat{W}_N(\beta) = e^{-\beta \hat{H}_N}, \quad (3)$$

它在坐标表象中的矩阵元为

$$\langle \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \cdots \mathbf{r}'_N | \hat{W}_N(\beta) | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \cdots \mathbf{r}_N \rangle = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \cdots \mathbf{r}'_N) \hat{W}_N(\beta) \psi_n(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \cdots \mathbf{r}_N), \quad (4)$$

函数系 $\{\psi_n\}$ ($n = 1, 2, \cdots$) 是某一完全正交系. 如果讨论的是全同粒子体系, 则必须引进对称的或反对称的完全系 $\{\psi_n^a\}$, 分别对应于玻色或费米统计. 定义

$$\langle \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \cdots \mathbf{r}'_N | W_N^a(\beta) | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \cdots \mathbf{r}_N \rangle = N! \sum_n \psi_n^{*a}(\mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \cdots \mathbf{r}'_N) \hat{W}_N(\beta) \psi_n^a(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \cdots \mathbf{r}_N), \quad (5)$$

则有如下关系:

$$\langle \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \cdots \mathbf{r}'_N | \hat{W}_N^a(\beta) | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \cdots \mathbf{r}_N \rangle = \sum_{P'} (\pm)^{P'} P' \langle \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \cdots \mathbf{r}'_N | \hat{W}_N(\beta) | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \cdots \mathbf{r}_N \rangle, \quad (6)$$

式中 P' 表示对坐标 $(\mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \cdots \mathbf{r}'_N)$ 的一种排列, 正负号分别对应于玻色与费米统计的情况.

与经典的集团展式相似, 现在引进 U^a -函数:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{1}' | \hat{W}_1^a(\beta) | \mathbf{1} \rangle &= \langle \mathbf{1}' | U_1^a(\beta) | \mathbf{1} \rangle, \\ \langle \mathbf{1}' \mathbf{2}' | \hat{W}_2^a(\beta) | \mathbf{12} \rangle &= \langle \mathbf{1}' | U_1^a(\beta) | \mathbf{1} \rangle \langle \mathbf{2}' | U_1^a(\beta) | \mathbf{2} \rangle + \\ &\quad + \langle \mathbf{1}' \mathbf{2}' | U_2^a(\beta) | \mathbf{12} \rangle, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (7)$$

式中已用字母 $\mathbf{1}, \mathbf{2}, \cdots$ 等代替了位置矢量 $\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \cdots$. 由 (7) 可把 U^a -函数表示成 W^a 函数, 再通过关系式 (6) 可以建立 U^a -函数和经典的 U -函数之间的直接联系. 在文献 [1] 第一篇文章中建立了

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{\infty} b_l^a Q^l, \quad (8)$$

式中

$$b_l^a = (Vl!)^{-1} \int_V \langle \mathbf{12} \cdots \mathbf{l} | U_l^a | \mathbf{12} \cdots \mathbf{l} \rangle d\mathbf{1} d\mathbf{2} \cdots d\mathbf{l}, \quad (9)$$

$$Q = e^\nu = e^{\beta\mu}, \quad (10)$$

μ 为化学势, V 为体系的体积. 在第一节中还建立了通过 U -函数求 U_l^a -函数的规则. 文献 [1] 的第四篇文章中用一套所谓“0-图”来表示 Q , 并导出了 [见该文中式 (IV. 18) 和 (IV. 82)]:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [Q^{-1} m(\mathbf{k})] - \frac{1}{\beta} \sum (\text{所有不同的并缩 0-图}), \quad (11)$$

式中

$$m(k) = \frac{e^{\beta\mu}}{1 \mp e^{\beta(\mu - k^2)}} = f_k^- e^{\beta k^2}, \quad (12)$$

$$f_k^- = 1/(e^{\beta(k^2 - \mu)} \mp 1). \quad (13)$$

上面的符号对应于玻色统计, 下面的符号对应于费米统计. 几个低级的“并缩 0-图”表示在图 1 中

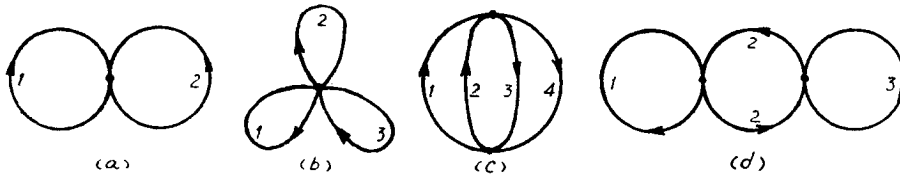


图 1

按照那里的图形规则,图 1(a), (b) 对应的算式为

$$\begin{aligned}
 \Delta Q &= -\frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{\beta(k_1^2 + k_2^2)} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \gamma_2^a | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle f_{k_1}^- f_{k_2}^- - \\
 &\quad - \frac{1}{6\beta} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} e^{\beta(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 | \gamma_3^a | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \rangle f_{k_1}^- f_{k_2}^- f_{k_3}^- = \\
 &= -\frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \eta_2^a | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle f_{k_1}^- f_{k_2}^- - \\
 &\quad - \frac{1}{6\beta} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 | \eta_3^a | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \rangle f_{k_1}^- f_{k_2}^- f_{k_3}^-, \quad (14)
 \end{aligned}$$

这里顶角 η_i^a 定义为

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \cdots \mathbf{k}'_l | \eta_l^a | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \cdots \mathbf{k}_l \rangle &= \langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \cdots \mathbf{k}'_l | e^{\beta \hat{H}_l^0} \gamma_l^a | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \cdots \mathbf{k}_l \rangle = \\
 &= \sum_{P'} (\pm 1)^{P'} P' \langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \cdots \mathbf{k}'_l | e^{\beta \hat{H}_l^0} U_l(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \cdots \mathbf{k}_l \rangle. \quad (15)
 \end{aligned}$$

以后我们把文献[1]的第二篇文章中的作图规则中的 $m(k)$ 用 f_k^- 来代替,同时顶角 γ_i^a 用 η_i^a 来代替,这样每一根内线直接对应一粒子动量分布函数,在低温极限下提供一密度因子。

三、热力学势的低密度极限及其与梯形近似的比较

在异常微扰理论的费曼图形中,如果在动量空间,顶角(或相互作用线)都是用相互作用势的傅里叶分量来表示,为要直接把现在的这种图形和动量表象中的费曼图形比较,最好是把这里的顶角 η_i^a 元件解开成相互作用势的傅里叶分量的级数,为此仅需完成 U -函数的表示。

令

$$\hat{W}_N^0(\beta) = \exp\{-\beta \hat{H}_N^0\} = \exp\left\{\beta \sum_{i=1}^N \hat{\Phi}_i^0\right\}, \quad (16)$$

$$\hat{W}_N(\beta) = \hat{W}_N^0(\beta) \hat{S}(\beta).$$

$\hat{S}(\beta)$ 满足布洛赫 (Bloch) 方程,解得

$$\begin{aligned}
 \hat{W}_N(\beta) &= \hat{W}_N^0(\beta) + \int_0^\beta \hat{W}_N^0(\beta - \beta') (-\hat{\Phi}_N) \hat{W}_N^0(-\beta') d\beta' + \\
 &\quad + \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' \hat{W}_N^0(\beta - \beta') (-\hat{\Phi}_N) \hat{W}_N^0(\beta' - \beta'') (-\hat{\Phi}_N) \hat{W}_N^0(\beta'') + \cdots. \quad (17)
 \end{aligned}$$

由 U -函数和 W -函数的关系式[它形式上和量子情况下的 U^a -函数和 W^a -函数的关系式一样,见(7)式]及(17)式可得:

$$\begin{aligned}\hat{U}_2(\beta) = & \int_0^\beta \hat{W}_2^0(\beta - \beta')(-V_{12})\hat{W}_2^0(\beta') d\beta' + \\ & + \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' \hat{W}_2^0(\beta - \beta')(-\hat{V}_{12})\hat{W}_2^0(\beta' - \beta'')(-\hat{V}_{12})\hat{W}_2^0(\beta'') + \cdots.\end{aligned}\quad (18)$$

在动量表象中, 矩阵元

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 | \hat{U}_2(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle = & \sum_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \sum_{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} \int_0^\beta \langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 | \hat{W}_2^0(\beta - \beta') | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle \langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | -\hat{V}_{12} | \mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6 \rangle \\ & \langle \mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6 | \hat{W}_2^0(\beta') | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle d\beta' + \cdots.\end{aligned}\quad (19)$$

矩阵元

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 | \hat{W}_2^0(\beta - \beta') | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle = & e^{(\beta' - \beta)(k_1'^2 + k_2'^2)} \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2), \\ \langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 | \hat{V}_{12} | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle = & V_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2}^{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} = V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2).\end{aligned}\quad (20)$$

$\delta(\mathbf{x})$ 在宗量 $\mathbf{x}$ 連續情況下表示狄喇克 (Dirac) δ 函数; 分裂情況下表示克罗尼克 (Kronecker) δ 符号.

在低温低密度极限, 热力学势的修正主要来自图 1(a) 的贡献, 其他的图形内綫数目至少有三根, 因此被限制在费米动量内部的求和至少增加一个, 结果是密度的高級項, 所以可以忽略. 因而我們只需計算 (14) 式右边的第二个表达式. 在 (19) 式中, 我們仅对 $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_2$ 及 $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_1$ 两种情况感兴趣, 同时注意到在低温极限下, 动量 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ 的求和被限制在费米动量 k_F 内部 (因为 f_k 在零温极限下为一阶梯函数). 忽略密度的高次項, 可以把 (19) 式右边的“中間态”动量求和限制在费米动量外部, 这样在附录中我們証明了

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 | \hat{U}_2(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle = & e^{-\beta E_{1'2'}} \left\{ \frac{e^{-\beta(E_{12} - E_{1'2'})} - 1}{(E_{12} - E_{1'2'})} V_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2}^{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} + \right. \\ & + \sum'_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2} \left[\frac{e^{-\beta(E_{12} - E_{1'2'})} - 1}{(E_{12} - E_{34})(E_{12} - E_{1'2'})} + \frac{e^{-\beta(E_{34} - E_{1'2'})} - 1}{(E_{34} - E_{12})(E_{34} - E_{1'2'})} \right] + \\ & + \sum'_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \sum'_{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} V_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} V_{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6}^{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2} \left[\frac{e^{-\beta(E_{12} - E_{1'2'})} - 1}{(E_{12} - E_{1'2'})(E_{12} - E_{34})(E_{12} - E_{56})} + \right. \\ & \left. + \frac{e^{-\beta(E_{34} - E_{1'2'})} - 1}{(E_{34} - E_{1'2'})(E_{34} - E_{56})(E_{34} - E_{12})} + \frac{e^{-\beta(E_{56} - E_{1'2'})} - 1}{(E_{56} - E_{1'2'})(E_{56} - E_{34})(E_{56} - E_{12})} \right] + \cdots \\ = & e^{-\beta E_{1'2'}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum'_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \cdots \sum'_{\mathbf{k}_{2n}} V_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \cdots V_{\mathbf{k}_{2n-1} \mathbf{k}_{2n}}^{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2} \\ & \sum_{i=1}^n \frac{e^{-\beta(E_{2i-1,2i} - E_{1'2'})} - 1}{\prod_{j=1}^n (E_{2i-1,2i} - E_{2j-1,2j})(E_{2i-1,2i} - E_{1'2'})} \cdots,\end{aligned}\quad (21)$$

式中已把 $k_{2i-1}^2 + k_{2i}^2$ 簡写为 $E_{2i-1,2i}$; $\prod_{j=1}^n$ 表示 $j = 1, 2, \cdots, n$, 但 $j \neq i$ 的所有項的連乘积, $E_{1'2'}$ 和 E_{12} 就是附录中所謂末态和初态的能量, $E_{34}, E_{56}, \cdots, E_{2n-1,2n}$ 等就是所謂“中間态”的能量, (21) 式中求和号上的 “'” 表示限制 $\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \cdots \mathbf{k}_{2n}$ 在费米动量 k_F 外面. 現在把 (21) 式代到 (15) 和 (14), 注意到:

$$\frac{e^{-\beta(E_{12}-E_{12})} - 1}{E_{12} - E_{12}} = -\beta,$$

在低温、低密度极限下,得到

$$\begin{aligned} \Delta Q = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} [V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}] \theta(k_F - k_1) \theta(k_F - k_2) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \cdots \sum_{\mathbf{k}_{2n}}' \frac{[V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} \cdots V_{\mathbf{k}_{2n-1} \mathbf{k}_{2n}}^{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} \cdots V_{\mathbf{k}_{2n-1} \mathbf{k}_{2n}}^{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}]}{(E_{12} - E_{31})(E_{12} - E_{56}) \cdots (E_{12} - E_{2n-1, 2n})} \times \\ & \times \theta(k_F - k_1) \theta(k_F - k_2) - \\ & - \frac{1}{2} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \cdots \sum_{\mathbf{k}_{2n}}' \sum_{i=2}^n \frac{[V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} \cdots V_{\mathbf{k}_{2n-1} \mathbf{k}_{2n}}^{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} \cdots V_{\mathbf{k}_{2n-1} \mathbf{k}_{2n}}^{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}]}{\prod_{j=1}^n (E_{2i-1, 2i} - E_{2j-1, 2j})(E_{2i-1, 2i} - E_{12})} \times \\ & \times [e^{-\beta(E_{2i-1, 2i} - E_{12})} - 1] f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- \end{aligned} \quad (22)$$

在上式中,我們引进阶梯函数 $\theta(k_F - k_1)$ 来代替 $f_{\mathbf{k}_1}^-$ 的零温极限:

$$\theta(k_F - k_1) = \begin{cases} 1 & \text{当 } k_F > k_1, \\ 0 & \text{当 } k_F < k_1. \end{cases} \quad (23)$$

(22) 式右边的末项随 $T \rightarrow 0$ 而消失, 結果在低温、低密度极限下相互作用对热力学势的修正为

$$\begin{aligned} \Delta Q = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} [V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}] \theta(k_F - k_1) \theta(k_F - k_2) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n+1} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \cdots \sum_{\mathbf{k}_{2n}}' \frac{[V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} \cdots V_{\mathbf{k}_{2n-1} \mathbf{k}_{2n}}^{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} - V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}_5 \mathbf{k}_6} \cdots V_{\mathbf{k}_{2n-1} \mathbf{k}_{2n}}^{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}]}{(E_{34} - E_{12})(E_{56} - E_{12}) \cdots (E_{2n-1, 2n} - E_{12})} \times \\ & \times \theta(k_F - k_1) \cdot \theta(k_F - k_2). \end{aligned} \quad (24)$$

(24) 式正是在零温极限下梯形图(见图 2)的贡献.

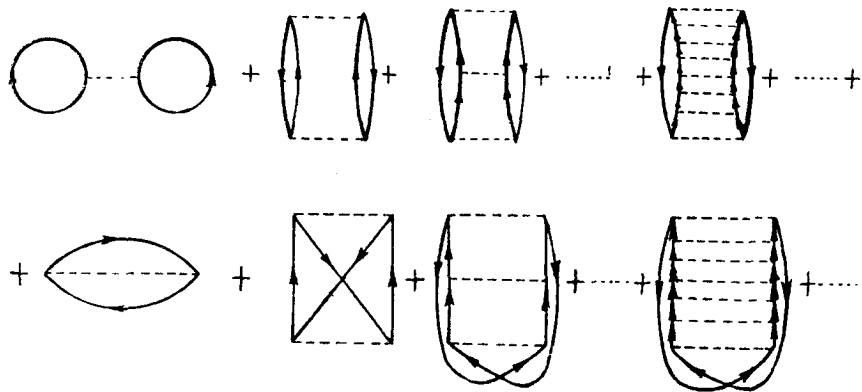


图 2 梯形近似

应该特别指出的, 在我們得到(24)时, 实际上丢掉了許多“反常图形”的贡献(这一点将在下一节的低级修正情况下比较明显). 康恩、刘亭格等^[9]指出, 这只有在各向同性相互作用下才正确. 在这里, 我們看到李、楊方法中低密度的图形 1(a) 包括了在場論中許

许许多多的图形的浓缩,最后归结为 U_2^a 矩阵元的计算,而 U_2^a 的计算可以从解二体薛定谔方程出发得到(见文献[1]的第一篇文章),这样求得的热力学势修正在零温极限下不论对各向同性相互作用还是对各向异性相互作用都是正确的。在低温下,李、杨的方法显得特别有利是在于图形十分简单,而寻常的费曼图形方法中,在有温度情况下还出现了许多很复杂的“反常图形”,我们很难能够把它们再浓缩,因而往往不能得到正确的结果。这一点是李、杨方法的很大优点。

如果我们引进 K 矩阵:

$$K_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} = V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} - \sum_{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} V_{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}^{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} \frac{1}{E_{34} - E_{12}} K_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}, \quad (25)$$

则(24)式可写成

$$\Delta Q_{\beta \rightarrow \infty} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}'' [K_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} - K_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_1}]. \quad (26)$$

(26)式中求和号上“''”表示 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ 求和限制在费米动量内部。表达式(25)、(26)是熟知的,现在即使对奇性相互作用(V 的傅里叶分量可趋向无限大),由(25)式求得的 K 仍旧是有限的。

四、热力学势按相互作用级展开

由于在李、杨的方法中是按碰撞元作为展开参量,因此图形中出现的各种顶角函数和相互作用的依赖关系比较复杂,而从上节的讨论初步看出,每个图形中每级相互作用所给出的项并不能直接和某一费曼图形比较,这样我们无法讨论所有图形——和费曼图形的比较,这里我们只在二级情况下和费曼图形进行比较。

从顶角函数 η_l^a 和相互作用级关系的一般分析知道,它的最低级是 $l-1$ 次,因此近似到相互作用一级,则只需考虑图 1(a),而近似到相互作用二级,则还需考虑图 1(b), (c), (d) 三个图。应用原文中的图形规则,以及对 η_3^a 最低级的计算,可求得:

(1) 图 1(a) 对热力学势的一级修正为

$$\Delta Q^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} [V(0) - V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)] f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^-. \quad (27)$$

它和一级费曼图形的贡献完全相同[见图 3(a), (b)]。

(2) 图 1(a) 对热力学势的二级修正是

$$\begin{aligned} -\beta \Delta Q_a^{(2)} = & \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} [V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2 - \\ & - V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] \frac{f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^-}{E_{34} - E_{12}} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} [V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2 - \\ & - V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] \frac{e^{-\beta(E_{34} - E_{12})} - 1}{(E_{12} - E_{34})^2} f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4). \end{aligned} \quad (28)$$

(3) 图 1(b) 对二级项的贡献是

$$\begin{aligned}
-\beta\Delta Q_b^{(2)} = & \frac{\beta^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} [V(0)^2 - V(0)V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) - V(0)V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \\
& + V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)] f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^- - \\
& - \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} [V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2 - V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)] \times \left\{ \frac{\beta f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^-}{E_{34} - E_{12}} + \right. \\
& \left. + \frac{e^{-\beta(E_{34}-E_{12})} - 1}{(E_{12} - E_{34})^2} f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^- \right\} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4). \quad (29)
\end{aligned}$$

(4) 图1(c) 对热力学势的二級修正的貢獻是

$$\begin{aligned}
-\beta\Delta Q_c^{(2)} = & \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} [V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) - V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)] \times \\
& \times [V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) - V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] \times \frac{e^{-\beta(E_{34}-E_{12})} - 1}{E_{34} - E_{12}} \times \\
& \times \frac{e^{-\beta(E_{12}-E_{34})} - 1}{E_{12} - E_{34}} f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^- f_{\mathbf{k}_4}^- \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) = \\
= & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} [V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)^2 - V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] \frac{e^{-\beta(E_{34}-E_{12})} - 1}{(E_{34} - E_{12})^2} \times \\
& \times f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^- f_{\mathbf{k}_4}^- \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4). \quad (30)
\end{aligned}$$

(5) 图 1(d) 对热力学势的二級修正的貢獻是

$$\begin{aligned}
-\beta\Delta Q_d^{(2)} = & -\frac{\beta^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} [V(0)^2 - V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)V(0) - V(0)V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \\
& + V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)] \times f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^- f_{\mathbf{k}_3}^+. \quad (31)
\end{aligned}$$

現在把(28)–(31)式全部加起来,經過一些运算,包括指标的調換和項的合并,可得到相互作用对热力学势的二級修正的表达式:

$$\begin{aligned}
\Delta Q^{(2)} = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} [V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2 - \\
& - V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] \frac{f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^+ f_{\mathbf{k}_4}^+}{E_{34} - E_{12}} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) - \\
& - \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} [V(0)^2 - V(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)V(0) - V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)V(0) + \\
& + V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)] \times f_{\mathbf{k}_1}^- f_{\mathbf{k}_2}^- f_{\mathbf{k}_3}^+ f_{\mathbf{k}_3}^-, \quad (32)
\end{aligned}$$

式中

$$f_k^+ = 1 - f_k^-, \quad f_k^- = 1/(e^{\beta(k^2-\mu)} + 1), \quad (33)$$

(32)式是适用于費米統計的情况,对于凝聚点以上的玻色統計,只需把(32)式右边方括号內的負項全改为正項,同时 f_k^+ 和 f_k^- 理解为

$$f_k^+ = 1 + f_k^-; \quad f_k^- = 1/(e^{\beta(k^2-\mu)} - 1) \quad (34)$$

就可以了。

仔細观察(32)式右边的表达式,发现第一項的貢獻正好和图 3(c), (d) 二个費曼图形的貢獻相同,而第二項的貢獻正好分別和图 3(e),(f),(g),(h)四个反常的費曼图形的貢獻相同。通过这一节的具体分析,我們发现,李、楊方法中的图形相当于在寻常的各个費曼图形中挑每个图形中的一部分貢獻濃縮起来的。在无穷多个費曼图形中,分別挑一些浓

縮成各級的“0-图”,在低温低密度极限下,主要的是挑选了所謂梯字图濃縮成图 1(a).由此我們看到,这种集团展式的方法很不同于尋常費曼图形的方法,对低温低密度情况下的費米体系,集团展式的方法就显得特別有利.它只需討論一个图形[图 1(a)],已能正

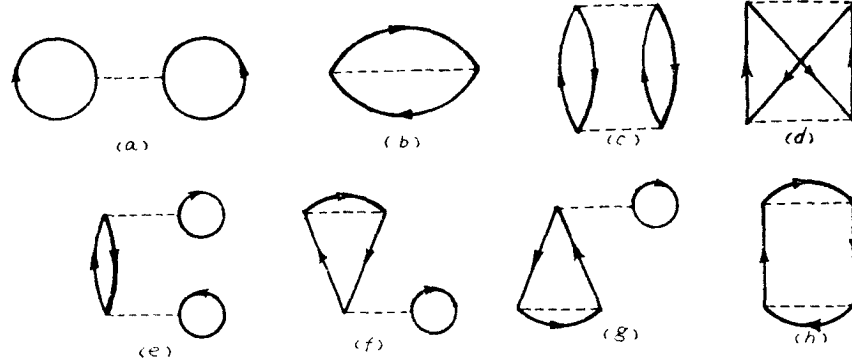


图 3

确給出热力学性質和密度、温度、相互作用的依賴关系,尋常費曼图形的方法就显得比較复杂.

导师周世助教授給了我許多指导,在此深致謝意.

附 录

現在我們来証明(21)式. 設 U_2 矩陣元中,“初态”对应的能量为 $E_0 \left(= \sum_{i=1}^2 k_i^2 \right)$,“末态”对应的能量为 $E'_0 \left(= \sum_{i=1}^2 k_i'^2 \right)$,所有“中間态”的能量分別用 $E_i (i = 1, 2, \dots, n, \dots)$ 来表示. 現在假定矩陣元 $\langle \mathbf{k}_1' \mathbf{k}_2' | U_2(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle$ 中第 n 級滿足等式

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1' \mathbf{k}_2' | U_2^{(n)}(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle &= \\ &= \sum_{\{\mathbf{k}_i\}} V(q_1) V(q_2) \cdots V(q_n) \sum_{i=0}^{n-1} \frac{e^{-\beta(E_i - E'_0)} - 1}{(E_i - E'_0) \prod_{j=1}^{n-1} (E_i - E_j)} e^{-\beta E'_0}, \quad (I) \end{aligned}$$

式中 $\sum_{\{\mathbf{k}_i\}}$ 表示对所有中間态的独立动量求和, $V(q_i)$ 表示第 $i-1$ 个“态”到第 i 个“态”之間的相互作用矩陣元,在这里,我們記 $i=0$ 的状态为初态, $i=n$ 的状态为末态. 如果我們能进一步証明 $(n+1)$ 級也滿足此等式,那末,因为 $n=1, 2$ 等情况用直接計算确实滿足 (I) 的形式,所以对任意級情况也滿足 (I) 的形式,这样就証明了 (21) 式. 由 (18) 式得 $(n+1)$ 級的矩陣元是

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1' \mathbf{k}_2' | U_2^{(n+1)}(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle &= (-1)^{n+1} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \cdots \int_0^{\beta_n} d\beta_{n+1} \cdot \\ &\cdot \langle \mathbf{k}_1' \mathbf{k}_2' | e^{-(\beta - \beta_1)\hat{H}_0} V_{12} e^{-(\beta_1 - \beta_2)\hat{H}_0} V_{12} e^{-(\beta_2 - \beta_3)\hat{H}_0} \cdots V_{12} e^{-(\beta_{n+1} - \beta_0)\hat{H}_0} | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle = \\ &= (-1) \sum_{\{\mathbf{n}\}} \int_0^\beta d\beta_1 e^{\beta_1 E'_0} V(q_{n+1}) \langle \mathbf{n} | U_2^{(n)}(\beta_1) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle e^{-\beta E'_0}, \quad (II) \end{aligned}$$

式中状态 $\langle \mathbf{n} |$ 表示某一“中間态”， $\sum_{\{\mathbf{n}\}}$ 表示对所有中間态求和。利用 (I)，上式变为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | U_2^{(n+1)}(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle &= (-1) e^{-\beta E'_0} \int_0^\beta d\beta_1 \sum_{\{\mathbf{k}_i\}} V(q_1) V(q_2) \cdots V(q_{n+1}) \times \\ &\times \sum_{i=0}^{n-1} \frac{e^{\beta_1(E'_0 - E_i)} - e^{\beta_1(E'_0 - E_n)}}{(E_i - E_n) \prod_j^{n-1} (E_i - E_j)} = \\ &= (-1) e^{-\beta E'_0} \sum_{\{\mathbf{k}_i\}} V(q_1) V(q_2) \cdots V(q_{n+1}) \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} \frac{e^{\beta(E'_0 - E_i)} - 1}{(E'_0 - E_i) \prod_j^n (E_i - E_j)} - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{e^{\beta(E'_0 - E_n)} - 1}{(E'_0 - E_n) \prod_j^n (E_i - E_j)} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{III})$$

若能証明

$$-\sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\prod_j^n (E_i - E_j)} = \frac{1}{\prod_j (E_n - E_j)}, \quad (\text{IV})$$

則等式 (III) 立即可化为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | U_2^{(n+1)}(\beta) | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle &= e^{-\beta E'_0} \sum_{\{\mathbf{k}_i\}} V(q_1) V(q_2) \cdots V(q_{n+1}) \times \\ &\times \sum_{i=0}^n \frac{e^{-\beta(E_i - E'_0)} - 1}{(E_i - E'_0) \prod_j^n (E_i - E_j)}. \end{aligned} \quad (\text{V})$$

这正就是所要証明的。

現在我們来証明等式 (IV)。把 (IV) 左边通分，得

$$g(E_0, E_1, \cdots, E_n) \equiv \sum_{i=0}^{n-1} \frac{-1}{\prod_j^n (E_i - E_j)} \equiv \frac{f(E_0 E_1 \cdots E_n)}{\prod_{j=0}^{n-1} (E_n - E_j) \prod_{j>i(<n)} (E_i - E_j)}, \quad (\text{VI})$$

式中 $f(E_0 E_1 \cdots E_n)$ 是 $(E_0 E_1 \cdots E_n)$ 的某一多項式形状的函数，若把 $E_i (j \neq n)$ 当作变量 x_j ，則当 $x_i \rightarrow E_i (i \neq j)$ 时，(VI) 式中的分母将趋近于零，即 E_i 是分母中变量 x_j 的零点，而这时，

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\prod_j^n (E_i - E_j)} &\rightarrow \frac{1}{(E_i - E_0) \cdots (E_i - E_{i-1})(E_i - E_{i+1}) \cdots (E_i - E_{n-1})} + \\ &+ \frac{1}{(x_j - E_0)(x_j - E_1) \cdots (x_j - E_i) \cdots (x_j - E_{n-1})} + C(\text{不随 } x_j \rightarrow E_j \text{ 而 } \rightarrow \infty \text{ 的有限項}) \\ &\xrightarrow{x_j \rightarrow E_j} C. \end{aligned}$$

这就是說： $g(E_0, E_1, E_2, \cdots, E_n)$ 当 $E_i (j \neq n) \rightarrow E_i (i \neq j)$ 时，不应 $\rightarrow \infty$ 。从 (VI) 右边

看到, $f(E_0, E_1, \dots, E_{j-1}, x_j, E_{j+1}, \dots, E_n)$ 必须在 $x_j = E_j$ 处具有零, 即

$$f(E_0, E_1, \dots, E_n) = (E_i - x_j) f_1(E_0 \cdots E_n) \Longleftrightarrow (E_i - E_j) f_1(E_0 \cdots E_n). \quad (\text{VII})$$

因为 (VII) 对所有 $j \neq i \neq n$ 的情况都成立, 所以可写为

$$f(E_0 E_1 \cdots E_n) = A \prod_{j>i(\neq n)}^{n-1} (E_i - E_j). \quad (\text{VIII})$$

现在我们来确定上式中的系数 A . 从因次的要求, A 必须是无因次的常量. 从 (VI) 式左边知, 如果把 E_n 作为变量, 则 $E_i (i = 0, 1, 2, \dots, n-1)$ 是 g 的一级极点, 现在把 (VIII) 代入 (VI), 得

$$g(E_0, E_1, \dots, E_n) = \frac{A}{\prod_j^{n-1} (E_n - E_j)}, \quad (\text{IX})$$

当 $E_n \rightarrow E_i$ 时, 由 (VI) 及 (IX) 得

$$g(E_0, E_1, \dots, E_n) \xrightarrow{E_n \rightarrow E_i} \frac{-1}{\left[\prod_{j(\neq i)}^{n-1} (E_i - E_j) \right] (E_i - E_n)} \quad (\text{X})$$

及

$$g(E_0, E_1, \dots, E_n) \xrightarrow{E_n \rightarrow E_i} \frac{A}{\left[\prod_{j(\neq i)}^{n-1} (E_i - E_j) \right] \cdot [E_n - E_i]}.$$

比较 (X) 二式, 得 $A = 1$, 结果等式 (IV) 被证明了.

参 考 文 献

- [1] Lee, T. D. and Yang, C. N., *Phys. Rev.*, **113** (1959), 1165; *Phys. Rev.*, **117** (1960), 22.
- [2] Lee, T. D. and Yang, C. N., *Phys. Rev.*, **116** (1959), 25; *Phys. Rev.*, **117** (1960), 12.
- [3] Lee, T. D. and Yang, C. N., *Phys. Rev.*, **117** (1960), 897.
- [4] Franz Mohling, *Phys. Rev.*, **122** (1961), 1043.
- [5] Franz Mohling, *Phys. Rev.*, **122** (1961), 1062.
- [6] Franz Mohling, *Phys. Rev.*, **124** (1961), 583.
- [7] Bloch, C., and De Dominicis, C., *Nuclear Phys.*, **7** (1958), 459 [*Проб. Сов. Физ.*, **6** (1958), 74]; Matsubara, T., *Frog. Theore. Phys.*, **14** (1955), 351; Luttinger, J. M. and Ward, J. C., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 1417.
- [8] Goldstone, J., *Proc. Roy. Soc.*, **A329** (1957), 267.
- [9] Kohn, W. and Luttinger, J. M., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 41; Luttinger, J. M. and Ward, J. C., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 1417.