

高阶无规位相近似法与格林函数方法^{*†}

吴 式 枢

(吉林大学物理系)

不少作者^[1]曾证明, 无规位相近似 (RPA) 的本征方程可由格林函数方法推得, 但迄今我们尚未看到有作者对高阶无规位相近似 (HRPA) 也进行过类似的推导. 本文的目的是指出, 实际上存有一个颇简单的途径, 据此不仅 RPA 而且 HRPA 的本征方程都可容易地由格林函数方法导得. 让我们引入以下格林函数组:

$$G_{\lambda j}(\tau = t' - t) = \langle \Psi_0 | T \{ \mathcal{A}_\lambda^\dagger(t') \mathcal{A}_j(t) \} | \Psi_0 \rangle, \quad j = 1, 2, \dots, \mu, \quad (1)$$

式中 $\mathcal{A}_j(t) = \exp(i\mathbf{H}t) \mathcal{A}_j \exp(-i\mathbf{H}t)$, 而 $\mathcal{A}_\lambda$ 可选为 $\{\mathcal{A}_j, j = 1, 2, \dots, \mu\}$ 中的任一个算符. 按定义有

$$T \{ \mathcal{A}_\lambda^\dagger(t') \mathcal{A}_j(t) \} = [\mathcal{A}_\lambda^\dagger(t'), \mathcal{A}_j(t)]_\pm \epsilon(t' - t) \mp \mathcal{A}_j(t) \mathcal{A}_\lambda^\dagger(t'), \quad (2)$$

其中倘由 $\mathcal{A}_\lambda^\dagger \mathcal{A}_j$ 变换到 $\mathcal{A}_j \mathcal{A}_\lambda^\dagger$ 所涉及的费米子算符的置换是奇, 取上方的符号, 若为偶则取下方的符号, $[\mathcal{A}_\lambda^\dagger, \mathcal{A}_j]_\pm = \mathcal{A}_\lambda^\dagger \mathcal{A}_j \pm \mathcal{A}_j \mathcal{A}_\lambda^\dagger$ 且

$$\epsilon(t' - t) = \begin{cases} 1, & t' > t, \\ 0, & t' < t; \end{cases}$$

由式(2)可立即求得

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{\lambda j}(t' - t) = -i g_{\lambda j} \delta(t' - t) - \langle \Psi_0 | T \{ \mathcal{A}_\lambda^\dagger(t') [\mathbf{H}, \mathcal{A}_j(t)]_- \} | \Psi_0 \rangle, \quad (3)$$

这里 $g_{\lambda j}$ 表一常数, 其定义为

$$g_{\lambda j} = \langle \Psi_0 | [\mathcal{A}_\lambda^\dagger(t), \mathcal{A}_j(t)]_\pm | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | [\mathcal{A}_\lambda^\dagger, \mathcal{A}_j]_\pm | \Psi_0 \rangle. \quad (4)$$

熟知地, 倘引用收缩近似, 并忽略收缩后不能写为 $\{\mathcal{A}_j, j = 1, 2, \dots, \mu\}$ 的线性组合的项, 我们有

$$[\mathbf{H}, \mathcal{A}_j]_- \simeq \sum_k X_{jk} \mathcal{A}_k. \quad (5)$$

因 $[\mathbf{H}, \mathcal{A}_j(t)]_- = \exp(i\mathbf{H}t) [\mathbf{H}, \mathcal{A}_j]_- \exp(-i\mathbf{H}t)$, 这说明倘我们也引入式(5)的近似以计算 $[\mathbf{H}, \mathcal{A}_j(t)]_-$, 我们有

$$\langle \Psi_0 | T \{ \mathcal{A}_\lambda^\dagger(t') [\mathbf{H}, \mathcal{A}_j(t)]_- \} | \Psi_0 \rangle \simeq \sum_k X_{jk} G_{\lambda k}(t' - t). \quad (6)$$

注意, 实际上式(6)并不应简单地认为只是式(5)的一个推论, 因为倘我们应用摄动公式计算 $\langle \Psi_0 | T \{ \mathcal{A}_\lambda^\dagger(t') [\mathbf{H}, \mathcal{A}_j(t)]_- \} | \Psi_0 \rangle$, 我们将可立即发现所得 Feynman 图的一部分 (这部分所含图形的个数也仍是无穷多) 恰巧就是式(6)的右边, 这点不仅指出另一个推导式(6)的途径, 同时还清楚地告诉我们式(6)及式(5)所含近似的性质. 以式(6)代入式(3)容

* 1965 年 8 月 19 日收到.

† 本文曾在 *Scientia Sinica* (中国科学), XIV (1965), No. 5 刊载过.

易求得

$$\omega G_{li}(\omega) = i g_{li} + \sum_k X_{ik} G_{lk}(\omega), \quad (7)$$

式中 $G_{li}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} G_{li}(\tau)$ 表 $G_{li}(\tau)$ 的 Fourier 变换. 由于借助 Bogoliubov 变换, 将所得结论推广到引用有 BCS 型近似的情况并没有困难. 因此, 为了简洁也为了确定起见, 下面的讨论将假定我们未引入这类近似. 这样所有算符 $\mathcal{A}_i$ 都必须满足

$$[\mathfrak{N}, \mathcal{A}_i]_- = n_i \mathcal{A}_i, \quad (8)$$

其中 n 等于零或一整数(可正可负), $\mathfrak{N} = \sum_p \xi_p^\dagger \xi_p$ 表总粒子数算符. 熟知地, $G_{li}(\omega)$ 严格地满足以下关系:

$$G_{li}(\omega) = i \sum_n \left\{ \frac{\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_i^\dagger | \Psi_n^{(+)} \rangle \langle \Psi_n^{(+)} | \mathcal{A}_l | \Psi_0 \rangle}{\omega - (E_n^{(+)} - E_0) + i\alpha} \pm \frac{\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_i | \Psi_n^{(-)} \rangle \langle \Psi_n^{(-)} | \mathcal{A}_l^\dagger | \Psi_0 \rangle}{\omega + (E_n^{(-)} - E_0) - i\alpha} \right\}_{\alpha \rightarrow 0^+}, \quad (9)$$

其中 $\{\Psi_n^{(+)}, \mathbf{H}\Psi_n^{(+)} = E_n^{(+)}\Psi_n^{(+)}\}$ 与 $\{\Psi_n^{(-)}, \mathbf{H}\Psi_n^{(-)} = E_n^{(-)}\Psi_n^{(-)}\}$ 分别表一个含有 $N+n$ 个粒子与一个含有 $N-n$ 个粒子体系的完整本征函数系列, 又倘 n 为奇, 取上方的符号, 若为偶或零则取下方的符号. 以式(9)代入式(7)并以 $[\omega - (E_n^{(+)} - E_0)]$ 乘所得等式的两边再取极限 $\omega \rightarrow (E_n^{(+)} - E_0)$, 立即可得¹⁾

$$(E_n^{(+)} - E_0) \langle \Psi_n^{(+)} | \mathcal{A}_i | \Psi_0 \rangle = \sum_k X_{ik} \langle \Psi_n^{(+)} | \mathcal{A}_k | \Psi_0 \rangle; \quad (10)$$

同理如以 $[\omega + (E_n^{(-)} - E_0)]$ 乘所得等式的两边, 然后取极限 $\omega \rightarrow -(E_n^{(-)} - E_0)$, 有

$$-(E_n^{(-)} - E_0) \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_i | \Psi_n^{(-)} \rangle = \sum_k X_{ik} \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_k | \Psi_n^{(-)} \rangle. \quad (11)$$

式(10)与(11)说明, 以下本征方程

$$\sum_k X_{ik} C_k = \varepsilon C_i \quad (12)$$

不仅确定一个 $(N+n)$ 粒子体系同时也确定一个 $(N-n)$ 粒子体系的本征值与本征函数. 但我们注意, 如式(12)的一个本征解 $\{\varepsilon_\sigma, \mathbf{C}(\sigma)\}$ 属于 $(N+n)$ 粒子体系, 那么它就一定不能同时也属于 $(N-n)$ 粒子体系, 反之亦然. 设这命题不真, 那么通过适当编排这二体系本征态的序号, 恒可使下式成立

$$\varepsilon_\sigma = (E_\sigma^{(+)} - E_0) = -(E_\sigma^{(-)} - E_0), \quad (13)$$

由此必有

1) 注意, 即使存有退化, 式(10)与(11)依然成立. 首先我们看到, 正常退化不会影响这二个等式. 例如, 让我们考虑由旋转不变性所引起的正常退化. 熟知地, 这时必须这样选择 $\mathcal{A}_i$, 使之对应于同一总角量子数 J 与磁量子数 M , 由此有

$$\begin{aligned} & \sum_\mu \langle \Psi_0(00) | \mathcal{A}_i^\dagger(JM) | \Psi_n^{(+)}(J\mu) \rangle \langle \Psi_n^{(+)}(J\mu) | \mathcal{A}_i(JM) | \Psi_0(J_0=0, M_0=0) \rangle \\ & = \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_i^\dagger(JM) | \Psi_n^{(+)}(JM) \rangle \langle \Psi_n^{(+)}(JM) | \mathcal{A}_i(JM) | \Psi_0 \rangle, \text{ Q.E.D.} \end{aligned}$$

对于偶然退化可引用如下的论证方法: 代替 $\mathbf{H}$, 让我们引入一个新的哈密顿量 $\mathbf{H} + \rho \delta \mathbf{H}$, 这里 ρ 表一参数, $\delta \mathbf{H}$ 可如此选择以使偶然退化消除. 按文中所述方法, 对这新的哈密顿量可求得相应的式(10)与(11), 然后令 $\rho \rightarrow 0$, 立即证得, 对于 $\mathbf{H}$, 式(10)与(11)也依然成立.

$$2E_0 - E_0(N+n) - E_0(N-n) = \Delta E_\sigma^{(+)} + \Delta E_\sigma^{(-)} \geq 0, \quad (14)$$

式中 $\Delta E_\sigma^{(+)} = E_\sigma^{(+)} - E_0(N+n)$ 与 $\Delta E_\sigma^{(-)} = E_\sigma^{(-)} - E_0(N-n)$ 分别表 $(N+n)$ 与 $(N-n)$ 粒子体系的激发能. 因按定义, E_0 表一个 N 粒子体系的严格基态的本征能量, 且这基态的零级近似具有满壳结构, 式(14)显然不能成立¹⁾, 因而命题得证. 这说明, 倘 $\{\langle \Psi_\sigma^{(+)} | \mathcal{A}_j | \Psi_0 \rangle, j=1, 2, \dots, \mu\}$ 构成一个可取的本征矢量, 那么必有

$$\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_j | \Psi_\sigma^{(-)} \rangle = 0, \quad j=1, 2, \dots, \mu, \quad (15)$$

亦即 $G_{ij}(\omega)$ 中实际上不应含有 $\omega = -(E_\sigma^{(-)} - E_0)$ 的极点, 显然反之亦真. 根据式(10)与(11), 所有由式(12)确定的本征值严格地说都应实的. 但因久期矩阵 $\mathbf{X}\{(\mathbf{X})_{ik} = X_{ik}\}$ 一般不是厄米的, 有时我们却可由式(12)求得复数的 ε ^[2], 虽然复数的本征值仍可有物理意义, 我们愿意指出, 只有当 ε 是实的或近似地 $\text{Im } \varepsilon \simeq 0$ 时, 式(12)的解才是可取的. 注意, 为了得式(12), 我们也可引用以下格林函数组:

$$G_{j\lambda}(t' - t) = \langle \Psi_0 | T \{ \mathcal{A}_j^\dagger(t') \mathcal{A}_\lambda(t) \} | \Psi_0 \rangle, \quad j=1, 2, \dots, \mu. \quad (1')$$

仿照由式(1)导至式(10)与(11)的论证方法, 由式(1')我们有

$$(E_n^{(+)} - E_0) \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_j^\dagger | \Psi_n^{(+)} \rangle = \sum_k X_{jk}^* \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_k^\dagger | \Psi_n^{(+)} \rangle, \quad (10')$$

$$-(E_n^{(-)} - E_0) \langle \Psi_n^{(-)} | \mathcal{A}_j^\dagger | \Psi_0 \rangle = \sum_k X_{jk}^* \langle \Psi_n^{(-)} | \mathcal{A}_k^\dagger | \Psi_0 \rangle. \quad (11')$$

取式(10')与(11')的复数共轭可得

$$(E_n^{(+)} - E_0)^* \langle \Psi_n^{(+)} | \mathcal{A}_j | \Psi_0 \rangle = \sum_k X_{jk} \langle \Psi_n^{(+)} | \mathcal{A}_k | \Psi_0 \rangle, \quad (10'')$$

$$-(E_n^{(-)} - E_0)^* \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_j | \Psi_n^{(-)} \rangle = \sum_k X_{jk} \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_k | \Psi_n^{(-)} \rangle. \quad (11'')$$

比较式(10), (11)与式(10''), (11''), 命题立即得证. 最后让我们借这个机会对常用的推导方法作一些注释. 熟知地, 如以 $\mathcal{A} = \sum_j a_j \mathcal{A}_j$ 代入

$$[\mathbf{H}, \mathcal{A}]_- = \varepsilon \mathcal{A}, \quad (16)$$

并引用式(5), 我们有

$$\sum_k X_{kj} a_k = \varepsilon a_j. \quad (17)$$

由式(17)与式(12)所定的本征值显然互相相同, 虽然倘 $X_{kj} \neq X_{jk}$, 由这二本征方程所确定的本征矢量却一般有不同的表象. 注意, 我们并不应认为式(17)是算符方程(16)的一个直接推论, 因这将隐含着对任一波函数 $|\Phi\rangle$ 均应有 $[\mathbf{H}, \mathcal{A}]_- |\Phi\rangle \simeq \sum_k X_{jk} \mathcal{A}_k |\Phi\rangle$,

这显然是不可能的, 因收缩近似里曾假定, 依单粒子情态 a 处于费米面上或下有 $n_a = 0$ 或 1, 很明显, 后者只有当 $[\mathbf{H}, \mathcal{A}]_-$ 作用于 $|\Psi_0\rangle$ 时才可能成立; 这说明, 我们必须认为式(17)实际上只应是以下 Schrödinger 方程

$$[\mathbf{H}, \mathcal{A}]_- |\Psi_0\rangle = \varepsilon \mathcal{A} |\Psi_0\rangle \quad (18)$$

的推论. 根据变分原理容易看出, 这已说明由 RPA 与 HRPA 所得解一定只是推广的组态

1) 式(14)唯一可以成立的情形是 $\{n=0, \sigma=0\}$, 但这却无实际意义, 因其所指就是 E_0 与 $|\Psi_0\rangle$.

混合法^[3]的一个近似;其次为了使式(17)是式(18)的一个必然推论,应要求 $\mathcal{A}_j|\Psi_0\rangle$, $j = 1, 2, \dots, \mu$, 均是相互线性无关的,这时所有式(17)的解均是式(18)的解,且这 μ 个解均属于 $(N+n)$ 粒子体系. 另一方面倘 $\{a_j(\sigma), j = 1, 2, \dots, \mu\}$ 是式(17)的一个本征矢量,那么不仅 $\mathcal{A}(\sigma) = \sum_j a_j(\sigma)\mathcal{A}_j$ 满足式(18), 而且 $\mathcal{A}^+(\sigma) = \sum_j a_j^*(\sigma)\mathcal{A}_j^\dagger$ 必满足

$$[\mathbf{H}, \mathcal{A}^+(\sigma)]|\Psi_0\rangle = -\varepsilon_\sigma \mathcal{A}^+(\sigma)|\Psi_0\rangle. \quad (19)$$

这说明,如 $\mathcal{A}^+(\sigma)|\Psi_0\rangle \neq 0$, 它将是一个 $(N-n)$ 粒子体系对应于能量本征值 $E_0^{(-)} = E_0 - \varepsilon_\sigma$ 的本征函数. 根据式(14)这是不可能的,倘 $\{\varepsilon_\sigma, a_j(\sigma)\}$ 已属于 $(N+n)$ 粒子体系,即我们必有

$$\mathcal{A}^+(\sigma)|\Psi_0\rangle = 0, \quad \sigma = 1, 2, \dots, \mu. \quad (20)$$

显然上式只不过是式(15)的另一表达形式. 如果这 μ 个函数 $\mathcal{A}_j|\Psi_0\rangle$ 中只有 ν 个是线性独立的,由式(12)或根据 Baranger^[4] 所建议的一个推导方法容易看出,式(17)仍是正确的,但现在式(17)的 μ 个本征解中只有 ν 个可能是式(18)的解,且从式(18)的角度看其余 $\mu - \nu$ 个都是没有意义的. 让我们以 $\sigma = 1, 2, \dots, \nu$ 表式(17)中属于式(18)的 ν 个解的序号,以 $\sigma = \nu + 1, \dots, \mu$ 表其余解的序号. 根据式(14)应有 $\mathcal{A}^+(\sigma)|\Psi_0\rangle = 0$ ($\sigma = 1, 2, \dots, \nu$),但 $\mathcal{A}^+(\sigma)|\Psi_0\rangle$ ($\sigma = \nu + 1, \dots, \mu$) 却可以不等于零,因后者现并不受任何条件的限制. 我们已提到,倘 $\mathcal{A}^+(\sigma)|\Psi_0\rangle \neq 0$ ($\sigma = \nu + 1, \dots, \mu$),它们将是式(19)的解,即式(17)的本征解全都可有物理意义¹⁾. 所以会有这结果,自然是因为如从式(19)出发,我们将也同样会导得式(17),但我们看到,式(17)的内容却既和式(18)也和式(19)不完全一样,也就是:虽从后者之一出发就可导得式(17),而式(17)的内容却相当于是式(18)与(19)二者之和. 由式(9)至(12)容易看出,这一表面上看有些奇怪的现象,从格林函数方法可得到一个很自然的解释. 粒子-空穴相互作用的 RPA 计算可充作这方面的一个典型举例,这里因 $n = 0$,由式(18)与(19)出发所得结论完全相同:式(17)中只有 $\mu/2$ 个解是可取的;但事实上,式(17)的其余 $\mu/2$ 个解也同样有物理意义,因后者恰巧给予我们粒子-空穴格林函数的负极点以及和这些极点有关的振幅. 这指出,正象我们在文献[5]中曾强调过,根据式(12)将 RP-HRP 近似的本征方程解释为格林函数的极点本征方程,比根据式(18)或(19)将它解释为通常的能量本征方程更符合实际,且根据前一解释,为何 RP-HRP 近似的久期矩阵不是厄米的也并不足以奇怪,此外式(12)是否恰当,将只和式(6)所引近似是否合适有关.

参 考 文 献

- [1] Thouless, D. J., *Nucl. Phys.*, **22**(1961),78; Fukuda, N., Iwamoto, F. & Sawada, K., *Phys. Rev.*, **135** (1964), A932.
- [2] Fano, G. & Sawicki, J., *Nuovo Cim.*, **25**(1962), 586.
- [3] 吴式枢,物理学报, **21** (1965), 12;676.
- [4] Baranger, M., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 957.
- [5] 吴式枢, *Scientia Sinica* (中国科学), **14** (1965), 792; 物理学报(待发表).

1) 文中未考虑由于守恒律受到计算中所引近似的破坏而引起的假态,后者请参看文献[1].