

研 究 简 报

关于无规位相近似法与推广的 组态混合法的一点注记*

吴 式 枢
(吉林大学物理系)

最近我们曾证明^[1,2], 无规与高阶无规位相近似 (RPA 与 HRPA) 是推广的组态混合 (GCM) 法的近似。因由 GCM 方法所得久期矩阵是厄米的, 而由 RPA 与 HRPA 所得却一般不是, 这引人怀疑, 是否由 RPA 与 HRPA 所得结果恒是合理的。本文的目的是指明, 由于 RPA 与 HRPA 的本征方程也可由格林函数方法推得^[3,2], 非厄米性并不影响它的合理性。作为举例并为了简洁, 本文将只针对粒子-空穴相互作用的 RPA 进行具体讨论; 我们将证明, 后者的本征方程实际上可改写成平常的 Schrödinger 本征方程的形式。让我们引入粒子-空穴算符

$$\mathcal{A}_{aa'} \equiv \mathcal{A}_{aa'}(JMTM_T) = \sum_{m_a m_{a'} \tau_a \tau_{a'}} \xi_{a' m_a \tau_a}^\dagger \xi_{a' j_{a'} \bar{m}_{a'} \tau_{a'}} s_{a'} C_{j_a m_a j_{a'} m_{a'}}^J C_{\frac{1}{2} \tau_a \frac{1}{2} \tau_{a'}}^{T M_T}, \quad (1a)$$

及空穴-粒子算符

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{A}}_{aa'} &\equiv \tilde{\mathcal{A}}_{aa'}(JMTM_T) = (-1)^{J-M+T-M_T} \mathcal{A}_{a'a}^\dagger(J\bar{M}\bar{T}\bar{M}_T) \\ &= (-1)^{j_{a'}-j_a+J+T} \mathcal{A}_{a'a}(JMTM_T); \end{aligned} \quad (1b)$$

式中 $\bar{a} \equiv -a$, $s_{a'} = (-1)^{j_{a'}-m_{a'}+\frac{1}{2}-\tau_{a'}}$, 且我们恒将以脚标 α' , β' , $\dots$ 表已填充的, 而以 α , β , $\dots$ 表未填充的单粒情态。熟知地, 粒子-空穴相互作用的 RPA 本征方程为

$$\begin{bmatrix} A & B \\ -B & -A \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}, \quad (2)$$

其久期矩阵有些引人奇怪是非厄米的。应用格林函数方法, Thouless^[3] 曾导得式(2), 据此我们看到, 虽然式(2)的本征值 $\varepsilon = \pm (E - E_0)$ (其中 $E - E_0$ 表体系的激发能), 但 ε 的直接物理含意却是表粒子-空穴相互作用格林函数的 Fourier 变换的极点。这表明, 虽然由式(2)可以求得所有由平常的 Schrödinger 本征方程所能给予的结论, 但它却不是平常的 Schrödinger 本征方程, 因此也就不存在明显的理由要求式(2)的久期矩阵必须是厄米的。显然, 由 GCM 方法求得的本征方程却是平常的 Schrödinger 本征方程。这样, 就可提出一个问题, 式(2)和 GCM 方法的相互关系究竟如何? 让我们引入以下粒子-空穴格林函数:

* 1965年11月11日收到。

$$\begin{aligned}
 G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau = t' - t) &= \langle \Psi_0 | T \{ \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger(t') \mathcal{A}_{\alpha\alpha'}(t) \} | \Psi_0 \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega),
 \end{aligned} \quad (3a)$$

式中

$$\mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger(t') = e^{i\mathbf{H}t'} \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger e^{-i\mathbf{H}t'}, \quad \mathcal{A}_{\alpha\alpha'}(t) = e^{i\mathbf{H}t} \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} e^{-i\mathbf{H}t}.$$

此外我们还将理解, 例如

$$\begin{aligned}
 G(\beta'\beta, \alpha\alpha'; \tau) &= \langle \Psi_0 | T \{ \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger(t') \mathcal{A}_{\alpha\alpha'}(t) \} | \Psi_0 \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G(\beta'\beta, \alpha\alpha'; \omega).
 \end{aligned} \quad (3b)$$

设这 $2n$ 个函数 $\mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle$ 与 $\tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle$ 是线性独立的, 我们可以选

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha\alpha'} \{ x_{\alpha\alpha'} \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} + y_{\alpha\alpha'} \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} \} | \Psi_0 \rangle \quad (4)$$

为试探波函数, 由此按 GCM 方法所得本征方程可写为

$$\left. \begin{aligned}
 \sum_{\alpha\alpha'} \{ [\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger[\mathbf{H}, \mathcal{A}_{\alpha\alpha'}] | \Psi_0 \rangle - \varepsilon \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle] x_{\alpha\alpha'} + \\
 + [\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger[\mathbf{H}, \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'}] | \Psi_0 \rangle - \varepsilon \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle] y_{\alpha\alpha'} \} = 0, \\
 \sum_{\alpha\alpha'} \{ [\langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger[\mathbf{H}, \mathcal{A}_{\alpha\alpha'}] | \Psi_0 \rangle - \varepsilon \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle] x_{\alpha\alpha'} + \\
 + [\langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger[\mathbf{H}, \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'}] | \Psi_0 \rangle - \varepsilon \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle] y_{\alpha\alpha'} \} = 0,
 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

式中 $\varepsilon = E - E_0$ 表体系的激发能. 倘已由 $\mathbf{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0$ 求得了 Ψ_0 , 式(5)显然是已知的; 但如能找到直接计算 $\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle$ 与 $\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger[\mathbf{H}, \mathcal{A}_{\alpha\alpha'}] | \Psi_0 \rangle$ 等的方法, 为了使式(5)为已知, 我们却没有必要先去求解 Ψ_0 . 在文献[1]中曾指出, 应用一种近似计算这些矩阵元的方法可使我们由式(5)求得式(2), 此外且有

$$\left. \begin{aligned}
 \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger[\mathbf{H}, \mathcal{A}_{\alpha\alpha'}] | \Psi_0 \rangle &= i \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial \tau} G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau), \\
 \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle &= \lim_{\tau \rightarrow 0} G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau),
 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

等等. 注意, 倘矩阵元 $\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle$ 等已知或已由近似方法求得, 所选 $2n$ 个基函数 $\mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle$ 与 $\tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle$ 是否真的线性无关, 可容易地通过以下本征方程进行判断:

$$\left. \begin{aligned}
 \sum_{\alpha\alpha'} \{ \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle C_{\alpha\alpha'} + \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle \tilde{C}_{\alpha\alpha'} \} &= \lambda C_{\beta\beta'}, \\
 \sum_{\alpha\alpha'} \{ \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle C_{\alpha\alpha'} + \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle \tilde{C}_{\alpha\alpha'} \} &= \lambda \tilde{C}_{\beta\beta'}.
 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

熟知地, 如式(7)的本征值 $\{\lambda_i, i = 1, 2, \dots, 2n\}$ 都大于零, 则这 $2n$ 个基函数是相互线性独立的; 如 $\{\lambda_i\}$ 中有 μ 个等于零, 则基函数中只有 $2n - \mu$ 个是线性独立的, 这时代替式(4), 显然可以将试探波函数简单地写为只是这 $2n - \mu$ 个线性独立的基函数的线性组合; 最后, 如 $\{\lambda_i\}$ 中有一些是负的, 这将表明, 我们对矩阵元 $\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle$ 等所选的近似是不够恰当的, 因倘以这些矩阵元的严格值代入式(7), 其本征值必定是实的且 ≥ 0 . 现让我们应用由 RPA 求得的解来计算式(6). 我们将假定式(2)的本征向量集合

$\left\{ \begin{bmatrix} X(\sigma) \\ Y(\sigma) \end{bmatrix}, \sigma = 1, 2, \dots, 2n \right\}$ 是完备的, Thouless^[3] 曾证明, 这时我们有

$$\left. \begin{aligned} G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega) &= \sum_{\sigma=1}^{2n} \frac{\text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) X_{\beta\beta'}(\sigma) X_{\alpha\alpha'}^*(\sigma)}{\varepsilon_{\sigma} - \omega}, \\ G(\beta\beta', \alpha'\alpha; \omega) &= \sum_{\sigma=1}^{2n} \frac{\text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) X_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{\alpha\alpha'}^*(\sigma)}{\varepsilon_{\sigma} - \omega}, \\ G(\beta'\beta, \alpha\alpha'; \omega) &= \sum_{\sigma=1}^{2n} \frac{\text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) Y_{\beta\beta'}(\sigma) X_{\alpha\alpha'}^*(\sigma)}{\varepsilon_{\sigma} - \omega}, \\ G(\beta'\beta, \alpha'\alpha; \omega) &= \sum_{\sigma=1}^{2n} \frac{\text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) Y_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{\alpha\alpha'}^*(\sigma)}{\varepsilon_{\sigma} - \omega}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

式中 $\text{sign}(\varepsilon_{\sigma})$ 表 ε_{σ} 的符号, 即

$$\text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) = \begin{cases} 1, & \varepsilon_{\sigma} > 0, \\ -1, & \varepsilon_{\sigma} < 0. \end{cases}$$

依式(3), $G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau)$ 也可写为

$$G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau) = \begin{cases} \sum_m \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle e^{-i(E_m - E_0)\tau}, & \tau > 0, \\ \sum_m \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger | \Psi_0 \rangle e^{i(E_m - E_0)\tau}, & \tau < 0, \end{cases} \quad (9)$$

由此有

$$\begin{aligned} G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega) &= \left\{ - \sum_m \frac{\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_0 \rangle}{\omega - (E_m - E_0) + i\alpha} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_m \frac{\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger | \Psi_0 \rangle}{\omega + (E_m - E_0) - i\alpha} \right\}_{a \rightarrow 0^+} \\ &= G_+(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega) + G_-(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega); \end{aligned} \quad (10)$$

式中 $G_+(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega)$ 表 $G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega)$ 的正极点部分, $G_-(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega)$ 表其负极点部分. 对比式(9)与(10), 容易看出

$$\left. \begin{aligned} G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau > 0) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_+} d\omega e^{-i\omega\tau} G_+(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega), \\ G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau < 0) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_-} d\omega e^{-i\omega\tau} G_-(\beta\beta', \alpha\alpha'; \omega), \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

其中 $\Gamma_+(\Gamma_-)$ 表一沿实轴由 $-\infty$ 到 $+\infty$ 再通过一在下(上)半平面的半径为 ∞ 的半圆周

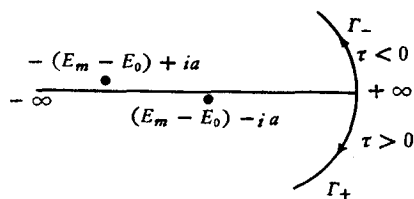


图 1

回到实轴的积分线路(参看图 1)。以式(8)代入式(11),由式(6)可立即求得

$$\left. \begin{aligned} \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{aa'} | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n X_{\beta\beta'}(\sigma) X_{aa'}^*(\sigma), \\ \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger \tilde{\mathcal{A}}_{aa'} | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n X_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{aa'}^*(\sigma), \\ \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger \mathcal{A}_{aa'} | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n Y_{\beta\beta'}(\sigma) X_{aa'}^*(\sigma), \\ \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger \tilde{\mathcal{A}}_{aa'} | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n Y_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{aa'}^*(\sigma), \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

与

$$\left. \begin{aligned} \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger [\mathbf{H}, \mathcal{A}_{aa'}] | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n \varepsilon_\sigma X_{\beta\beta'}(\sigma) X_{aa'}^*(\sigma), \\ \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\beta\beta'}^\dagger [\mathbf{H}, \tilde{\mathcal{A}}_{aa'}] | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n \varepsilon_\sigma X_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{aa'}^*(\sigma), \\ \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger [\mathbf{H}, \mathcal{A}_{aa'}] | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n \varepsilon_\sigma Y_{\beta\beta'}(\sigma) X_{aa'}^*(\sigma), \\ \langle \Psi_0 | \tilde{\mathcal{A}}_{\beta\beta'}^\dagger [\mathbf{H}, \tilde{\mathcal{A}}_{aa'}] | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\sigma=1}^n \varepsilon_\sigma Y_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{aa'}^*(\sigma). \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

式中我们使用了 $\sigma = 1$ 至 n 表式(2)所含本征值为正的解。让我们首先以式(12)代入式(7),容易求得,这时式(7)的 $2n$ 个本征值中有 n 个等于零。这说明, Thouless 所求得的 RPA 解[式(8)]隐含着,我们对 $|\Psi_0\rangle$ 选择了这样的近似,以致 $2n$ 个基函数 $\mathcal{A}_{aa'}|\Psi_0\rangle$ 与 $\tilde{\mathcal{A}}_{aa'}|\Psi_0\rangle$ 中只有 n 个是线性独立的。实际上这点也可简单地通过以下途径看出。让我们引入

$$\mathcal{A}_\sigma = \sum_{aa'} \{X_{aa'}(\sigma) \mathcal{A}_{aa'} - Y_{aa'}(\sigma) \tilde{\mathcal{A}}_{aa'}\}, \quad \sigma = 1, 2, \dots, 2n. \quad (14)$$

应用式(12)与本征向量 $\begin{bmatrix} X(\sigma) \\ Y(\sigma) \end{bmatrix}$ 所满足的正交归一化关系

$$[X^\dagger(\sigma') - Y^\dagger(\sigma')] \cdot \begin{bmatrix} X(\sigma) \\ Y(\sigma) \end{bmatrix} = \text{sign}(\varepsilon_\sigma) \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (15)$$

可立即证得

$$\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\sigma'}^\dagger \mathcal{A}_\sigma | \Psi_0 \rangle = \sum_{\sigma''=1}^n \delta_{\sigma'\sigma''} \delta_{\sigma\sigma''} = \begin{cases} \delta_{\sigma'\sigma}, & \text{如 } \sigma', \sigma = 1, 2, \dots, n, \\ 0, & \text{如 } \sigma' \text{ 或 } \sigma = n+1, \dots, 2n. \end{cases} \quad (16)$$

式(16)不仅告诉我们 $\{\mathcal{A}_\sigma|\Psi_0\rangle, \sigma = 1, 2, \dots, n\}$ 构成一正交归一化系,因而是互相线性独立的,而且有

$$\mathcal{A}_\sigma|\Psi_0\rangle = 0, \quad \sigma = n+1, \dots, 2n. \quad (17)$$

因本征向量 $\begin{bmatrix} X(\sigma) \\ Y(\sigma) \end{bmatrix}$ 还满足以下完备性关系:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\sigma=1}^{2n} \text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) X_{\beta\beta'}(\sigma) X_{\alpha\alpha'}^*(\sigma) &= \delta_{\beta\alpha} \delta_{\beta'\alpha'}, \\ \sum_{\sigma=1}^{2n} \text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) X_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{\alpha\alpha'}^*(\sigma) &= 0, \\ \sum_{\sigma=1}^{2n} \text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) Y_{\beta\beta'}(\sigma) X_{\alpha\alpha'}^*(\sigma) &= 0, \\ \sum_{\sigma=1}^{2n} \text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) Y_{\beta\beta'}(\sigma) Y_{\alpha\alpha'}^*(\sigma) &= -\delta_{\beta\alpha} \delta_{\beta'\alpha'}, \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

由上式与式(14)可立即求得

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{A}_{\alpha\alpha'} &= \sum_{\sigma=1}^{2n} \text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) X_{\alpha\alpha'}^*(\sigma) \mathcal{A}_{\sigma}, \\ \tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'} &= \sum_{\sigma=1}^{2n} \text{sign}(\varepsilon_{\sigma}) Y_{\alpha\alpha'}^*(\sigma) \mathcal{A}_{\sigma}. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

式(17)与(19)明显地说明, $2n$ 个基函数 $\mathcal{A}_{\alpha\alpha'}|\Psi_0\rangle$ 与 $\tilde{\mathcal{A}}_{\alpha\alpha'}|\Psi_0\rangle$ 在 RPA 所含近似下只有 n 个是线性独立的. 现让我们将试探波函数重新写为

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma=1}^n C_{\sigma} \mathcal{A}_{\sigma} |\Psi_0\rangle, \quad (20)$$

这样由 GCM 方法所得本征方程为

$$\sum_{\sigma=1}^n \{ \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\sigma'}^{\dagger} [\mathbf{H}, \mathcal{A}_{\sigma}] | \Psi_0 \rangle - \varepsilon \delta_{\sigma'\sigma} \} C_{\sigma} = 0, \quad \sigma' = 1, 2, \dots, n; \quad (21)$$

式中 $\varepsilon = E - E_0$ 仍为体系的激发能. 式(21)的久期矩阵显然是厄米的, 我们还将证明, 它且是对角化了的. 事实上, 应用式(13), (14)与(15)立即有

$$\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_{\sigma'}^{\dagger} [\mathbf{H}, \mathcal{A}_{\sigma}] | \Psi_0 \rangle = \varepsilon_{\sigma} \delta_{\sigma'\sigma}, \quad \sigma', \sigma = 1, 2, \dots, n. \quad (22)$$

上式说明, 式(21)的 n 个本征解就是 $\{\varepsilon_{\sigma}, \mathcal{A}_{\sigma}|\Psi_0\rangle\}$, 命题因而得证. 注意, 虽然式(2)的阶数为 $2n$, 但其本征解中只有本征值为正的 n 个才表体系的激发能与相应的激发态波函数. 我们看到, 式(21)重新说明这样一个简单的事实: 为了确定这 n 个激发态的能量与波函数, 只需一个 n 阶的 Schrödinger 本征方程就够了. 最后, 由于只需将 $G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau)$ 等的 RPA 解代入式(6), 由 GCM 方法所得解就与由 RPA 所得结果一致. 这还告诉我们, 倘能将 $G(\beta\beta', \alpha\alpha'; \tau)$ 等计算得更准确, 那么我们将可求得比 RPA 更好的解. 下一文里^[4]我们将阐明, 据此的确可找着一个相当简单和系统的、可求得比 RPA 更好解的途径.

参 考 文 献

- [1] 吴式枢, 物理学报, **21** (1965), 12; 674.
- [2] 吴式枢, 中国科学, **14** (1965), 798; 物理学报, **22** (1966), 377.
- [3] Thouless, D. J., *Nucl. Phys.*, **22** (1961), 78.
- [4] 吴式枢, 关于推广的组态混合法 I (未发表).