多粒子系统的量子理论

〔美〕A. L. 费特　J. D. 瓦立克　著

陈俊文　孙景李　梁昆淼　译

北京师范大学
1193420
藏书

科学出版社

1984

内 容 简 介

本书用二次量子化和量子场论方法论述非相对论性多粒子系统的量子理论及其在核物理和低温物理方面的应用．本书可作为研究生的教科书．读者在量子力学课程基础上研读本书以后，即可阅读多粒子量子理论的专题著作和研究论文．

第一一九章由陈俊文翻译；第十章和第十二一十四章由梁昆淼翻译；第十一章、第十五章和附录由孙景李翻译． 初译稿曾由梁昆淼校订，但最终译文仍由各章译者自行负责．

A. L. Fetter J. D. Walecka

QUANTUM THEORY OF MANY-PARTICLE SYSTEM

McGraw- Hill, 1971

多粒子系统的量子理论

〔美〕A. L. 费特 J. D. 瓦立克 著

陈俊文 孙景李 梁昆淼 译

责任编辑 陈咸亨

科学出版社出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1984 年 4 月第 一 版 开本：787×1092 1/32

1984 年 4 月第一次印刷 印张：23 7/8

印数：0001—5,450 字数：545,000

统一书号：13031・2514

本社书号：3453・13—3

定价： 3.65 元

序　　言

本书是从一学年的研究生课程发展而来的.从 1964 年以来，我们就在 Stanford 大学讲授该课程. 这门课程通常分为三部分：前面的三分之一论述多体理论，其余三分之二论述多体理论在核子物理和低温物理中的应用. 虽然物理学的这些领域在过去二十年中迅速成长，现在已成为研究生课程的标准部分，但我们发现还没有适合研究生水平的入门教科书. 本书试图填补一年级研究生量子力学课程与多体理论的专著及独创性研究之间的空隙.

我们的两个基本目的是：(1) 提供非相对论性多粒子系统的统一处理，(2) 使内容是完整的，这就是说无需经常援引其他著作，就能将有关材料阐述清楚. 第一个目的对于学生尤其重要，因为众多的文献中包含着许多种不同的处理方法. 本书的论述始终根据二次量子化和量子场论方法. 选择这些技巧，主要是因为它们有力而灵活；它们构成了固态物理、低温物理、核子物理、原子物理和分子物理这些形形色色的领域中当前理论工作的基础. 我们已尽可能地努力揭示这些课题的本质上的统一性，用以反对当前将理论日益局限于特定范围的趋势，我们相信这是可能的.

本书分为五个主要部分. 在第一部分引入二次量子化，并对热力学和统计力学的一些基本概念作了论述. 第二部分用 Green 函数讨论互作用系集的基态和低激发态，并阐述 Fermi 系统和 Bose 系统的 Feynman-Dyson 微扰论. 在第三部分中将这种分析推广到有限温度，在有限温度下，一切测量

出来的量都是系综平均值. 第四部分包含正则变换方法的论述. 在这四个部分中，总是用电子气作为主要例子来说明. 不过，我们也考虑某些模型系统，例如刚球型的 Fermi 气体和 Bose 气体. 在第五部分中，我们把这些技巧应用于其他几种物理系统：核物质、相互作用的电子和声子、超导电体、超流氦和有限核. 第五部分共有五章，每章从基本的实验事实和理论的简短评述开始，假定读者并不具有专门的背景知识. 我们企图使每一章自成体系，很大程度上与其他章节无关，这样，教师就可以比较自由地选择特定应用进行讨论. 由于这个原因，本书对于一年课程稍为嫌长了一些.

我们相信，求解习题是学习中不可少的部分，我们尽力列入难度各不相同的有趣习题. 共计有 175 个以上的习题，各章末尾都有一些.

没有试图给出全面的文献目录，因为一本教科书不可能包括多粒子物理的一切发展. 所引参考文献只限于与我们的论述直接有关的.

假定读者已学过 Schiff 著《量子力学》(Schiff, Quantum Mechanics, Third Edition, McGraw-Hill Book Company) 那种水平的量子力学课程，并且对复变数与迴路积分知识要达到能够运用的地步. 对热力学、统计力学、Maxwell 方程有一定程度的熟悉，是有助于学习本书的. 而对固态物理和核子物理有初步了解，将更能深入理解本书内容.

列入了两个短的附录：定积分表和角动量理论综述.

感谢 L. I. Schiff 教授对这本著作的可贵的帮助.

A.L. 费特

J.D. 瓦立克

目　　录

第一部分　引论

第一章　二次量子化 …… 1

1．一次和二次量子化的 Schrödinger 方程 …… 2

玻色子 …… 5

多粒子 Hilbert 空间和产生与消灭算符 …… 12

费米子 …… 16

2．场 …… 21

3．例：简并电子气体 …… 23

第二章　统计力学 …… 40

4．热力学和统计力学的回顾 …… 40

5．理想气体 …… 44

玻色子 …… 46

费米子 …… 55

第二部分　基态(零温度)理论

第三章　格林函数和场论(费米子) …… 63

6．三种图象 …… 63

Schrödinger 图象 …… 63

相互作用图象 …… 64

Heisenberg 图象 …… 69

寝渐绝热"加场" …… 71

量子场论中关于基态的 Gell-Mann 和 Low 定理 …… 72

7．Green 函数 …… 77

定义 …… 77

与可观察量的关系 …… 78
例：自由费米子 …… 85
Lehmann 表示 …… 87
Green 函数的物理解释 …… 97
8. Wick 定理 …… 101
9. 微扰论的图解分析 …… 113
坐标空间中的 Feynman 图解 …… 114
动量空间中的 Feynman 图解 …… 124
Dyson 方程 …… 129
Goldstone 定理 …… 138
第四章 费米系统 …… 149
10. Hartree-Fock 近似 …… 149
11. 非理想 Fermi 气体 …… 159
刚球散射 …… 160
动量空间中的散射理论 …… 162
梯形图解和 Bethe-Salpeter 方程 …… 164
Galitskii 积分方程 …… 176
正规自能 …… 179
物理量 …… 185
保留各有关项的理由 …… 189
12. 简并电子气体 …… 191
基态能量和介电常数 …… 191
环形图解 …… 196
Π^0 的计算 …… 200
相关能 …… 208
有效相互作用 …… 212
第五章 线性响应和集体模 …… 218
13. 对外界微扰的线性响应的一般理论 …… 218
14. 电子气体中的屏蔽 …… 222
15. 电子气体中的等离子体振荡 …… 229

16. 非理想 Fermi 气体中的零声 …… 234
17. 非弹性的电子散射 …… 239
第六章 Bose 系统 …… 253
18. 问题的表述方式 …… 253
19. Green 函数 …… 259
20. 微扰论和 Feynman 规则 …… 264
相互作用图象 …… 264
坐标空间中的 Feynman 规则 …… 266
动量空间中的 Feynman 规则 …… 267
Dyson 方程 …… 269
Lehmann 表示 …… 273
21. 弱相互作用 Bose 气体 …… 274
22. 具有相斥核心的稀薄 Bose 气体 …… 278

第三部分 有限温度理论

第七章 有限温度下的场论 …… 286
23. 温度 Green 函数 …… 286
定义 …… 286
与可观察量的关系 …… 287
例：无相互作用系统 …… 292
24. 有限温度下的微扰论与 Wick 定理 …… 294
相互作用图象 …… 295
$\mathcal{G}$ 的周期性 …… 297
Wick 定理的证明 …… 298
25. 图解分析 …… 304
坐标空间中的 Feynman 规则 …… 305
动量空间中的 Feynman 规则 …… 307
对频率求和的计算 …… 313
26. Dyson 方程 …… 316
第八章 有限温度下的物理系统 …… 323

27. Hartree-Fock 近似 …… 323
28. 温度靠近 T_c 的非理想 Bose 气体 …… 328
29. 低温下非理想 Fermi 气体的比热 …… 331
$\mathcal{G}$ 的低温展开式 …… 331
Hartree-Fock 近似 …… 332
熵的计算 …… 336
30. 电子气体 …… 339
近似的正规自能 …… 340
环形图解求和 …… 344
近似的热力学势 …… 347
经典极限 …… 350
零温度极限 …… 357

第九章 实时 Green 函数和线性响应 …… 371
31. 推广的 Lehmann 表示 …… 371
$\bar{G}$ 的定义 …… 371
推迟和超前函数 …… 373
温度 Green 函数和解析延拓 …… 378
32. 有限温度下的线性响应 …… 380
一般理论 …… 380
密度相关函数 …… 382
33. 电子气中的屏蔽 …… 386
34. 电子气中的等离子体振荡 …… 391

第四部分 正则变换

第十章 正则变换 …… 397
35. 相互作用 Bose 气体 …… 397
36. Cooper 对偶 …… 406
37. 相互作用 Fermi 气体 …… 414

第五部分　在各种物理系统中的应用

第十一章　核物质 …… 430

38. 核力：综述 …… 430

39. 核物质 …… 438

核半径与电荷分布 …… 439

半经验质量公式 …… 440

40. 独立粒子 (Fermi 气体)模型 …… 444

41. 独立对偶 近似 (Brueckner理论) …… 451

自洽 Bethe-Goldstone 方程 …… 452

非奇异方阱势的解 …… 455

纯刚性核势的解 …… 458

具有“真实”势的核物质的性质 …… 463

42. 与 Green 函数和 Bethe-Salpeter 方程的关系 …… 477

43. 核物质中的能隙 …… 484

第十二章　声子和电子 …… 492

44. 无相互作用声子系统 …… 492

拉格朗日函数和哈密顿函数 …… 494

Debye 比热理论 …… 496

45. 电子-声子作用 …… 500

46. 耦合场理论 …… 504

$T = 0$ 时的 Feynman 规则 …… 504

等效电子-电子作用 …… 507

顶点部分与 Dyson 方程 …… 508

47. Migdal 定理 …… 513

第十三章　超导电性 …… 521

48. 超导电体的基本性质 …… 521

基本实验事实 …… 521

热力学关系式 …… 526

49. London-Pippard唯象理论 …… 529

London 方程的导出 …… 530
半空间和板块的解 …… 531
准磁通（fluxoid）的守恒和量子化 …… 533
Pippard 的推广方程 …… 536
50. Ginzburg-Landau 唯象理论 …… 542
自由能的展开式 …… 543
简单情况下的解 …… 545
磁通量子化 …… 548
表面能 …… 549
51. 微观（BCS）理论 …… 553
一般表述 …… 554
有关均匀介质的解 …… 560
能隙函数 $\Delta(T)$ 的决定 …… 564
热力学函数 …… 567
52. 对弱磁场的线性响应 …… 573
一般核的导出 …… 574
Meissner效应 …… 580
Pippard（非定域)极限的穿透深度 …… 582
非定域积分关系式 …… 586
53. Ginzburg-Landau 方程的微观推导 …… 589
第十四章 超流氦 …… 607
54. He II 的基本性质 …… 609
基本的实验事实 …… 609
Landau 准粒子模型 …… 613
55. 弱相互作用的 Bose 气体 …… 618
一般表述 …… 619
均匀凝聚态 …… 624
非均匀凝聚态 …… 627
第十五章 对有限系统的应用：原子核 …… 638
56. 变到粒子与空穴的一般正则变换 …… 639

57. 单粒子壳层模型 …… 644
有心势中的近似 Hartree-Fock 波函数与能级编序…… 644
自旋轨道分裂 …… 648
单粒子矩阵元 …… 649
58. 壳层中的多粒子 …… 653
两个价粒子：一般的相互作用与 $\delta(x)$ 力…… 653
几个粒子：正常耦合 …… 659
配对力问题 …… 664
玻色子近似 …… 668
Bogoliubov 变换…… 670
59. 激发态：运动方程的线性化 …… 684
Tamm-Dancoff 近似 (TDA) …… 684
无规周相近似 (RPA) …… 687
基的约化 …… 691
$\delta(x)$ 型力的[15]维超多重态解 …… 695
对核的应用：O^{16} …… 706
60. 激发态：Green 函数方法…… 709
极化传播函数 …… 710
无规周相近似 …… 717
Tamm-Dancoff 近似 …… 719
在 RPA 中建造 $\Pi(\omega)$ …… 720
61. 真实的核力 …… 721
闭壳层外两个核子：独立对偶近似 …… 721
Bethe-Goldstone 方程…… 723
谐振子近似 …… 725
Pauli 原理改正 …… 731
推广计算其他物理量 …… 732

附录…… 736
A. 若干定积分 …… 736
B. 角动量理论的综述…… 739

基本对易关系 …… 739
两个角动量的耦合：Clebsch-Gordan 系数 …… 740
三个角动量的耦合：6-j 系数 …… 743
不可约张量算符和 Wigner-Eckart 定理 …… 745
耦合方案中的张量算符 …… 747
一些物理量数值 …… 749

第一部分 引 论

第一章 二次量子化

物理世界是由相互作用的多粒子系统组成的. 对这样的系统的准确描述要求在多粒子 Schrödinger 方程中计及粒子间的势能,这个问题构成本书的基本课题. 原则上说,在位形空间中的N体波函数包含了所有可能的信息. 但是, 直接求解这样的 Schrödinger 方程是不现实的. 因此,就必须求助于另一些技巧, 在这里我们将借助于二次量子化、量子场论和 Green 函数的应用. 在相对论性的理论中, 为描述粒子的产生和消灭,二次量子化的概念是至关紧要的[1]. 即使在非相对论性的理论中, 二次量子化也大大地简化了关于许多全同的相互作用的粒子的讨论[2]. 这个方法只不过把本来的 Schrödinger 方程重新表示为另一形式. 即使就这样, 它已经有几个显著的优点: 二次量子化算符在每一步都体现着统计性质(Bose 或 Fermi 统计),它完全不同于用单粒子波函数的对称或反对称乘积的那种较笨拙的方法; 而且量子场论方法也使我们能集中于有意义的少数几个矩阵元, 这样就避免了需要直接处理多粒子的波函数和所有其余粒子的坐标; 最后,

---

1) P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* (*London*) **11**[3]**A**: 243 (1927).

2) P. Jordan and O. Klein, *Z. Physik*, **45**. 751 (1927); P. Jordan and E. P. Wigner, *Z. Physik* **47**: 631 (1928); V. Fock, *Z. Physik*, **75**: 622 (1932). 虽然在细节上有不同,这里提出的方法是根据末一篇论文的精神.

Green 函数含有最重要的物理信息，例如基态能量和其它的热力学函数、激发态的能量和寿命以及对外界微扰的线性响应等.

遗憾的是，准确的 Green 函数一点也不比原来的波函数容易确定，因此，我们要利用微扰论，在这里是用 Feynman 规则和 Feynman 图解这种简明而又系统的语言表述出来的[1]. 这些规则使我们可以把物理量计算到微扰的任意一级. 我们还将证明，正如 Feynman 首先注意到的：不连接图解准确地相互抵消. 这种抵消导至连接集团展开式，并且明显地表示出所有物理量对体积的直接关系. 可以列出一组积分方程(Dyson 方程)，它的逐次迭代给出 Feynman-Dyson 微扰论，直到微扰参数的任意一级，而且这些积分方程与原来的微扰级数无关[2]. 由于多粒子系统的一些性质常常可能涉及耦合常数的非解析函数，因此，非微扰论近似的可能性是非常重要的.

此外，常常可能作出物理的近似，把二次量子化的哈密顿函数简化为二次型. 这样得到的问题，或是用正则变换，或是考察线性运动方程，可得出准确的解.

1. 一次和二次量子化的 Schrödinger 方程

我们的讨论将从仅仅用二次量子化语言改述 Schrödinger 方程开始. 几乎在所有有意义的情况中，哈密顿函数的形式为

$$H = \sum_{k=1}^{N} T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} V(x_k, x_l), \qquad (1.1)$$

1) R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **76**: 749(1949); **76**: 769 (1949).
2) F. J. Dyson, *Phys. Rev.*, **75**: 486 (1949); **75**: 1736 (1949).

这里 T 是动能，而 V 是粒子间的相互作用势能. 量 x_k 表示第 k 个粒子的坐标，包括空间坐标 $\mathbf{x}_k$ 和任意的不连续变量，例如费米子系统的自旋 z 分量，核子系统的同位旋 z 分量. 势能项表示每对粒子间的相互作用，各只计一次，这就解释了因子 1/2，双重求和分别对 k 和 l 进行，但要除去 k 等于 l 的各项. 对于这样的哈密顿函数，含时间的 Schrödinger 方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x_1\cdots x_N,t)=H\Psi(x_1\cdots x_N,t), \qquad (1.2)$$

同时波函数 Ψ 还应满足一组适当的边界条件.

在开始，我们用不含时间而体现边界条件的单粒子波函数的完全集合，来展开多粒子波函数 Ψ. 例如，对于一个大的均匀系统，很自然地用具有周期性边界条件的箱中的一组平面波来展开；换一种情况，对于原子中的相互作用的电子系统，通常就用单粒子库仑波函数的完全集合；最后，对于在晶格点阵中运动的粒子，一个方便的选择是适当周期势中的 Bloch 波函数的完全集合. 对单粒子波函数，我们将用一般的记号

$$\phi_{E_k}(x_k),$$

这里 E_k 表示单粒子量子数的完全集合. 例如，对于在箱中无自旋的玻色子系统，E_k 就表示 $\mathbf{p}$；对于有心力场中的无自旋粒子集合，E_k 表示 E、J 和 M；或对于均匀的费米子系统，E_k 表示 $\mathbf{p}$、s_z，等. 为了方便，设想这无限多个单粒子量子数的集合是按序排列的 $(1,2,3,\cdots,r,s,t,\cdots,\infty)$，而 E_k 遍及所有这些本征值. 现在我们把多粒子波函数展开如下：

$$\Psi(x_1\cdots x_N,t)=\sum_{E'_1\cdots E'_N}C(E'_1\cdots E'_N;t)\phi_{E'_1}(x_1)\cdots\phi_{E'_N}(x_N). \qquad (1.3)$$

这个表示式是完全一般的，只不过是多粒子波函数按态的完

全集合展开. 既然 $\psi_E(x)$ 不含时间，波函数与时间的关系就全部表现在系数 $C(E_1\cdots E_N,t)$ 中.

现在将方程(1.3)代入 Schrödinger 方程，然后乘以对应于固定量子数的集合 $E_1\cdots E_N$ 的伴随波函数的积 $\psi_{E_1}(x_1)^\dagger\cdots\psi_{E_N}(x_N)^\dagger$，再对所有有关的坐标积分(如果粒子有自旋，这还包括对自旋坐标的求和). 在左边，这一步给出对应于给定的量子数集合 $E_1\cdots E_N$ 的系数 C，因此得到方程

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C(E_1\cdots E_N,t)=&\sum_{k=1}^{N}\sum_{W}\int dx_k\psi_{E_k}(x_k)^\dagger T(x_k)\psi_W(x_k)\\&\times C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots E_N,t)\\&+\frac{1}{2}\sum_{k\neq l=1}^{N}\sum_{W}\sum_{W'}\iint dx_k dx_l\\&\times\psi_{E_k}(x_k)^\dagger\psi_{E_l}(x_l)^\dagger\\&\times V(x_k,x_l)\psi_W(x_k)\psi_{W'}(x_l)\\&\times C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots\\&\quad E_{l-1}W'E_{l+1}\cdots E_N,t).\end{aligned}\tag{1.4}$$

由于动能是单粒子算符，它每次只涉及一个粒子的坐标，因而它只能改变一个单粒子波函数. 单粒子波函数是正交归一的，这就保证，除第 k 个粒子外，所有粒子必须取原先给定的量子数，但是第 k 个粒子的波函数仍能遍及这个无限多的量子数的集合. 为了很明确起见，在上面的方程里，我们用 W 表示这个变动的指标. 对于势能，也有类似的结果. 但是，势能的情况稍许复杂一些，因为势能涉及两个粒子的坐标. 它至多改变两个粒子的波函数，例如第 k 个和第 l 个，而所有其它的量子数必须和原先挑出的量子数相同. 第 k 个粒子的量子数仍可遍及这无限多个值的集合，我们用 W 表示，而第 l 个粒子的量子数也可遍及这无限多个值的集合，用 W' 表示. 每一给定的量子数集合 $E_1\cdots E_N$ 各导致一个方程，这些方程构成多粒

子波函数的含时间的系数的一组无限多个联立微分方程组.

现在计入粒子的统计性质. 假设多粒子波函数有如下性质:

$$\Psi(\cdots x_i \cdots x_j \cdots, t) = \pm\Psi(\cdots x_j \cdots x_i \cdots, t), \quad (1.5)$$

这里，如上面讨论，对于费米子的系集，坐标 x_k 包括自旋坐标. 方程(1.5)表示在交换任意二个粒子的坐标时，波函数必须是或者对称的，或者反对称的. 方程(1.5)的一个充分必要条件是在交换相应的量子数时，展开式的系数自身也必须是或者对称的，或者反对称的，即

$$C(\cdots E_i \cdots E_j \cdots, t) = \pm C(\cdots E_j \cdots E_i \cdots, t). \quad (1.6)$$

方程(1.6)的充分性是容易看出的，只要在波函数上先交换粒子，然后再适当地交换傀变量. 用单粒子波函数的正交归一性，从波函数中挑出一个特定的系数，然后用总的波函数的性质(1.5)，就能证明必要性. 这样，我们可以将波函数的全部对称性转化成系数 C 的集合的对称性.

玻色子

上述方程(1.5)[或(1.6)]中要用正号的粒子称玻色子，我们暂时集中注意于这种系统. 由于系数在量子数交换下是对称的，我们可以把任何系数中出现的量子数重新编组. 在给定的量子数集合 $E_1 \cdots E_N$ 中，设状态 1 占据 n_1 次，状态 2 占据 n_2 次，等等，例如

$$C(1\,2\,1\,3\,2\,4\cdots, t) = C(\underbrace{1\,1\,1\cdots}_{n_1}\underbrace{2\,2\,2}_{n_2}\cdots\cdots, t).$$

在波函数的展开式中，凡是在态 1 有 n_1 个粒子、在态 2 有 n_2 个粒子，等等，所有这些项具有同样的系数. 为方便起见，给这个系数一个新的名字

$$\bar{C}(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) \equiv C(\underbrace{1\,1\,1}_{n_1}\cdots\underbrace{2\,2\,2}_{n_2}\cdots\cdots, t). \qquad (1.7)$$

考虑多粒子波函数的归一化. 这归一化条件可用符号表示为

$$\int |\Psi|^2 (d\tau) = 1, \qquad (1.8)$$

这意思是，取这波函数，乘以它的伴随波函数，然后对所有可能取的坐标积分. 由此而得的归一化保证了在位形空间各处找到这系统的几率的总和是1.单粒子波函数的正交归一性立即给出展开系数 C 的相应条件

$$\sum_{E_1 \cdots E_N} |C(E_1 \cdots E_N, t)|^2 = 1. \qquad (1.9)$$

在相同的态中粒子数相同的所有系数相等，我们现在利用这个性质用系数 $\bar{C}$ 来改写这个条件

$$\sum_{n_1 n_2 \cdots n_\infty} |\bar{C}(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t)|^2 \sum_{\substack{E_1 \cdots E_N \\ (n_1 n_2 \cdots n_\infty)}} 1 = 1. \qquad (1.10)$$

这里求和已分为两步： 首先，按照给定的占据数集合 $(n_1, n_2, \cdots, n_\infty)$，就量子数 $E_1, E_2, \cdots, E_N$ 的一切可能值进行求和，然后，就所有占据数集合求和. 显然，这一步只不过是把和中的所有项重新编组而已. 按照给定占据数集合对所有可能的量子数求和问题等价于将 N 个物体放进一些匣子中，在第一个匣子放 n_1 个物体，在第二个匣子放 n_2 个物体，依次等等，这样做的可能的方式有 $N!/n_1!n_2!\cdots n_\infty!$ 种. 这样，我们就得到归一化条件的修订过的表述

$$\sum_{n_1 n_2 \cdots n_\infty} |\bar{C}(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t)|^2 \frac{N!}{n_1! n_2! \cdots n_\infty!} = 1. \qquad (1.11)$$

在这个式子中，绝大多数 n_i 是零，这是因为它们的总和是有限的，

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N. \tag{1.12}$$

按照定义，0! 等于 1，因而方程 (1.11) 这样写是完全有确定的意义的. 这个结果还可以表示得较简洁一些，只要再定义一个系数

$$f(n_1, n_2 \cdots n_\infty t) \equiv \left(\frac{N!}{n_1! n_2! \cdots n_\infty!}\right)^{\frac{1}{2}} \bar{C}(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t), \tag{1.13}$$

而这系数集合的相应的归一化条件是

$$\sum_{n_1 n_2 \cdots n_\infty} |f(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t)|^2 = 1, \tag{1.14}$$

这里集合 $\{n_i\}$ 必须满足方程 (1.12).

原来的波函数，现在可以改写如下：

$$\begin{aligned}
\Psi(x_1 \cdots x_N, t) &= \sum_{E_1 \cdots E_N} C(E_1 \cdots E_N, t) \psi_{E_1}(x_1) \cdots \psi_{E_N}(x_N) \\
&= \sum_{E_1 \cdots E_N} \bar{C}(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) \psi_{E_1}(x_1) \cdots \psi_{E_N}(x_N) \\
&= \sum_{n_1 n_2 \cdots n_\infty} f(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) \left(\frac{n_1! n_2! \cdots n_\infty!}{N!}\right)^{1/2} \\
&\quad \times \sum_{\substack{E_1 \cdots E_N \\ (n_1 n_2 \cdots n_\infty, t)}} \psi_{E_1}(x_1) \cdots \psi_{E_N}(x_N) \\
&= \sum_{\substack{n_1 n_2 \cdots n_\infty \\ (\sum_i n_i = N)}} f(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) \\
&\quad \times \Phi_{n_1 n_2 \cdots n_\infty}(x_1 x_2 \cdots x_N),
\end{aligned} \tag{1.15}$$

其中定义了

$$\begin{aligned}
&\Phi_{n_1 n_2 \cdots n_\infty}(x_1 \cdots x_N) \\
&\equiv \left(\frac{n_1! n_2! \cdots n_\infty!}{N!}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\substack{E_1 \cdots E_N \\ (n_1 n_2 \cdots n_\infty)}} \psi_{E_1}(x_1) \cdots \psi_{E_N}(x_N).
\end{aligned} \tag{1.16}$$

方程(1.15)是一个重要结果，它只不过是说，一个总的对称波函数，可以用完全对称化了的波函数 $\Phi_{n_1\cdots n_\infty}(x_1\cdots x_N)$ 作为完全的正交归一基来展开，而且这个展开式的系数就是 f 的集合．注意 Φ 的下列性质

$$\Phi(\cdots x_i\cdots x_j\cdots)=(\Phi\cdots x_j\cdots x_i\cdots), \tag{1.17}$$

$$\int dx_1\cdots dx_N\Phi_{n_1'n_2'\cdots n_\infty'}(x_1\cdots x_N)^\dagger\Phi_{n_1n_2\cdots n_\infty}(x_1\cdots x_N)$$
$$=\delta_{n_1'n_1}\cdots\delta_{n_\infty' n_\infty}. \tag{1.18}$$

交换粒子坐标，然后在定义方程(1.16)中相应地交换傀求和变量就直接推得式(1.17)；而式(1.18)是根据单粒子波函数的正交归一性得到的．作为一个明显的例子，我们将写出三个无自旋玻色子的波函数，其中二个玻色子处在基态(用下标1表示)，另一个玻色子处在第一激发态(用下标2表示)：

$$\Phi_{2100\cdots0}(x_1x_2x_3)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{3}}[\phi_1(1)\phi_1(2)\phi_2(3)+\phi_1(1)\phi_2(2)\phi_1(3)$$
$$+\phi_2(1)\phi_1(2)\phi_1(3)].$$

现在回过来分析方程(1.4)，这里重要的是记住：在这个表示式中，$E_1\cdots E_N$ 是给定的量子数集合．首先考虑动能项，它可以用一种明白的简单方式改写为

$$\sum_{k=1}^{N}\sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots E_N,t)$$
$$=\sum_{k=1}^{N}\sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle$$
$$\times\bar{C}(n_1n_2\cdots n_{E_k}-1\cdots n_W+1\cdots n_\infty,t). \tag{1.19}$$

这方程的右边显示了量子数 E_k 少出现一次，而量子数 W 则多出现一次．在遍及 k 的求和中，E_k 每取同一个值(比方说 E)一次(这将出现 n_E 次)，它对求和作出同样的贡献．因此，

对 k 从 1 到 N 的求和完全可以代之以对 E 的求和并写为

$$\sum_E n_E,$$

这是整个处理方法中的关键点. 这是说，对粒子的求和等价于对态的求和，而方程 (1.19) 成为

$$\sum_{k=1}^{N}\sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots E_N,t)$$
$$=\sum_{E}\sum_{W}\langle E|T|W\rangle n_E \times \bar{C}(n_1n_2\cdots n_E-1\cdots n_W+1\cdots n_\infty,t). \quad (1.20)$$

对 E 的求和现在有无限多项，它遍及所有的单粒子量子数，但是 n_E 的大多数都是零，因为在原来的给定量子数集合 $E_1\cdots E_N$ 中，大多数态并未被占据. 最后，为了方便，把记号简化，从而给出

$$\sum_{k=1}^{N}\sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots E_N,t)$$
$$=\sum_{i}\sum_{j}n_i\langle i|T|j\rangle \times \bar{C}(n_1n_2\cdots n_i-1\cdots n_j+1\cdots n_\infty,t). \quad (1.21)$$

完全相同的做法适用于势能项:

$$\frac{1}{2}\sum_{k\neq l=1}^{N}\sum_{W}\sum_{W'}\langle E_kE_l|V|WW'\rangle \times C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots E_{l-1}W'E_{l+1}\cdots E_N,t)$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{k\neq l=1}^{N}\sum_{W}\sum_{W'}\langle E_kE_l|V|WW'\rangle \times \bar{C}(n_1\cdots n_{E_k}-1\cdots n_W+1\cdots n_{E_l}-1\cdots n_{W'}+1\cdots n_\infty,t). \quad (1.22)$$

如上所述，在这个求和中，态 E_k 和 E_l 各自少出现一次，而态 W 和 W' 则各自多出现一次. 再者，E_k 每取同个一值（例如

说 E）一次(这出现 n_E 次)，而 E_l 每取同一个值（例如说E'）一次(这出现 $n_{E'}$ 次)，它对求和都作出同样的贡献．这里只在一点上稍许进一步复杂化，这就是在双重求和中的限制 $k \neq l$．这样，在上述求和中出现的项数必须如下进行计数：

$$\frac{1}{2}n_E n_{E'} \quad (\text{当 } E \neq E' \text{ 时});$$

$$\frac{1}{2}n_E(n_E - 1) \quad (\text{当 } E = E' \text{ 时}).$$

这是因为当 $E \neq E'$ 时，$k \neq l$ 的限制对计数没有影响，而当 $E = E'$ 时，在第二个求和中，本征值 E 应少计数一次．现在势能成为双重无限项的和，但是其中大多数因子 n_E 和 $n_{E'}$ 是零．因此，就像前面那样，可把方程(1.22)写成

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\sum_{k\neq l=1}^{N}\sum_{W}\sum_{W'}\langle E_k E_l|V|WW'\rangle \\
&\qquad\times C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots E_{l-1}W'E_{l+1}\cdots E_N,t) \\
&=\sum_{E}\sum_{E'}\sum_{W}\sum_{W'}\frac{1}{2}n_E(n_{E'}-\delta_{EE'})\langle EE'|V|WW'\rangle \\
&\qquad\times \bar{C}(n_1\cdots n_E-1\cdots n_W+1\cdots n_{E'}-1 \\
&\qquad\cdots n_{W'}+1\cdots n_\infty,t) \\
&=\sum_{i}\sum_{j}\sum_{k}\sum_{l}\frac{1}{2}n_i(n_j-\delta_{ij})\langle ij|V|kl\rangle \\
&\qquad\times \bar{C}(n_1\cdots n_i-1\cdots n_k+1\cdots n_j-1 \\
&\qquad\cdots n_l+1\cdots n_\infty,t).
\end{aligned} \tag{1.23}$$

如果把方程(1.13)所定义的系数 f 代入方程（1.21）和(1.23)，就得到下列无限的联立微分方程组

$$\begin{aligned}
&i\hbar\left[\frac{n_1!\cdots n_\infty!}{N!}\right]^{\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial t}f(n_1\cdots n_\infty,t) \\
&=\sum_{i}\langle i|T|i\rangle n_i\left[\frac{\cdots n_i!\cdots}{N!}\right]^{1/2}f(n_1\cdots n_i\cdots n_\infty,t)
\end{aligned}$$

$$+\sum_{i\neq j}\langle i|T|j\rangle n_i\left[\frac{\cdots(n_i-1)!\cdots(n_j+1)!\cdots}{N!}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times f(n_1\cdots n_i-1\cdots n_j+1\cdots n_\infty,t)$$
$$+\sum_{i\neq j\neq k\neq l}\langle ij|V|kl\rangle\frac{1}{2}n_in_j$$
$$\times\left[\frac{\cdots(n_i-1)!(\cdots n_j-1)!\cdots(n_k+1)!\cdots(n_l+1)!\cdots}{N!}\right]^{1/2}$$
$$\times f(\cdots n_i-1\cdots n_j-1\cdots n_k+1\cdots n_l+1\cdots n_\infty,t)$$
$$+\sum_{i=j\neq k\neq l}\langle ii|V|kl\rangle\frac{1}{2}n_i(n_i-1)$$
$$\times\left[\frac{\cdots(n_i-2)!\cdots(n_k+1)!\cdots(n_i+1)!\cdots}{N!}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times f(\cdots n_i-2\cdots n_k+1\cdots n_l+1\cdots n_\infty,t)$$
$$+\text{等等}\qquad(1.24)$$

这里“等等”代表指标 i、j、k 和 l 相等或不相等的其余 13 种可能情况. 在等式两边乘上因子 $(N!/n_1!n_2!\cdots n_\infty!)^{\frac{1}{2}}$，终于给出联立方程组

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(n_1\cdots n_\infty,t)$$
$$=\sum_i\langle i|T|i\rangle n_if(n_1\cdots n_i\cdots n_\infty,t)$$
$$+\sum_{i\neq j}\langle i|T|j\rangle(n_i)^{\frac{1}{2}}(n_j+1)^{\frac{1}{2}}$$
$$\times f(n_1\cdots n_i-1\cdots n_j+1\cdots n_\infty,t)$$
$$+\sum_{i\neq j\neq k\neq l}\langle ij|V|kl\rangle$$
$$\times\frac{1}{2}(n_i)^{\frac{1}{2}}(n_j)^{\frac{1}{2}}(n_k+1)^{\frac{1}{2}}(n_l+1)^{\frac{1}{2}}$$
$$\times f(n_1\cdots n_i-1\cdots n_j-1\cdots n_k+1$$
$$\cdots n_l+1\cdots n_\infty,t)$$
$$+\sum_{i=j\neq k\neq l}\langle ii|V|kl\rangle$$

$$\times \frac{1}{2}(n_i)^{\frac{1}{2}}(n_i-1)^{\frac{1}{2}}(n_k+1)^{\frac{1}{2}}(n_l+1)^{\frac{1}{2}}$$
$$\times f(n_1\cdots n_i-2\cdots n_k+1\cdots n_l+1\cdots n_\infty,t)$$
$$+\text{等等} \tag{1.25}$$

对于占据数数值的每个集合 $n_1n_2\cdots n_\infty$，就有一个这样的方程；这种形式的方程太复杂了．然而，正如下面的讨论所表明，有可能把这些方程改写为紧凑而简洁的形式．

多粒子 Hilbert 空间和产生与消灭算符

我们暂且将上述分析搁在一边，而来寻找一组完全不同的量子力学基底，它描述单粒子态的一个完全集合的各个态上的粒子占据数．为此，引入与时间无关的抽象的态矢量

$$|n_1n_2\cdots n_\infty\rangle$$

这个记号的意思是在本征态 1 上有 n_1 个粒子，在本征态 2 上有 n_2 个粒子，等等．我们要这个基底是完全的和正交归一的，那就要求这些态满足条件

$$\begin{cases}\langle n_1'n_2'\cdots n_\infty'|n_1n_2\cdots n_\infty\rangle \\ \qquad =\delta_{n_1'n_1}\delta_{n_2'n_2}\cdots\delta_{n_\infty'n_\infty} \quad \text{(正交性)}, \\ \sum\limits_{n_1n_2\cdots n_\infty}|n_1n_2\cdots n_\infty\rangle\langle n_1n_2\cdots n_\infty|=1 \quad \text{(完全性)}.\end{cases} \tag{1.26}$$

注意完全性条件中的求和是遍及所有可能的占据数的，而没有什么别的限制．为了使这个基底更具体，引入与时间无关的算符 b_k、$b_k^\dagger$，它们满足对易定则

$$\begin{cases}[b_k,b_{k'}^\dagger]=\delta_{kk'} \quad \text{(对玻色子)}, \\ [b_k,b_{k'}]=[b_k^\dagger,b_{k'}^\dagger]=0.\end{cases} \tag{1.27}$$

这正是谐振子的产生和消灭算符的对易定则．这些算符的一切性质都直接来自对易定则，例如[1]

1) 参看 L. I. Schiff, "Quantum Mechanics", 3d ed., pp 182—183, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968.

$$\begin{cases} b_k^\dagger b_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle \ (n_k = 0, 1, 2\cdots, \infty), \\ b_k |n_k\rangle = n_k^{\frac{1}{2}} |n_k - 1\rangle, \\ b_k^\dagger |n_k\rangle = (n_k + 1)^{\frac{1}{2}} |n_k + 1\rangle. \end{cases} \tag{1.28}$$

粒子数算符 $b_k^\dagger b_k$ 的本征值谱包括了一切正整数和零. b_k 是消灭算符，它使占据数减少 1 并在态上乘以 $n_k^{\frac{1}{2}}$；$b_k^\dagger$ 是产生算符，它使本征值增加 1 并在态上乘以 $(n_k + 1)^{\frac{1}{2}}$. 这些关系式的证明在任何一本标准的量子力学书中都有；所有这些关系式全来自对易定则，这一点是很关键的，因而这里给出方程(1.28) 的证明.

算符 $b^\dagger b$ 是厄密算符，因而有实数的本征值；把这个算符称为粒子数算符. 粒子数算符的本征值大于或等于零，这可从下列关系式看出

$$\begin{aligned} n = \langle n | b^\dagger b | n \rangle &= \sum_m \langle n | b^\dagger | m \rangle \langle m | b | n \rangle \\ &= \sum_m |\langle m | b | n \rangle|^2 \geqslant 0. \end{aligned} \tag{1.29}$$

现在考虑对易关系，它来自方程 (1.27)，

$$[b^\dagger b, b] = -b. \tag{1.30}$$

用方程 (1.30) 容易看出，算符 b 作用在本征值为 n 的本征态上给出粒子数算符的一个新的本征态，其本征值减少 1. 这个结果的证明如下

$$\begin{aligned} b^\dagger b(b|n\rangle) &= b(b^\dagger b)|n\rangle + [b^\dagger b, b]|n\rangle \\ &= (n - 1)(b|n\rangle). \end{aligned} \tag{1.31}$$

将 b 重复地作用于任一本征态，最后必然给出零，因为否则方程 (1.31) 将导致粒子数算符的本征值为负的态，这是与方程 (1.29) 矛盾的. 因此，零是粒子数算符一个可能的本征值. 按照完全相同的方式，伴随的对易定则

$$[b^\dagger b, b^\dagger] = b^\dagger \tag{1.32}$$

表明 $b^\dagger$ 是产生算符，使粒子数算符的本征值增加 1. 这样，

方程 (1.28) 中的第一个式子已经证明. 此外,方程(1.29) 和 (1.31) 相结合给出方程 (1.28) 的第二个式子,除了有一个总周相以外,但这周相可不失一般性地选为1. 至于方程(1.28) 的最后一个式子可用完全类似的方法证明[1].

上面的讨论限于单个的模,但是,容易验证,不同模的粒子数算符可对易,这意味着总的系统的本征态可以是集合 $\{b_k^\dagger b_k\} \equiv \{n_k\}$ 的共同本征态. 特别说一下,我们所要的占据数基底态不过就是各个模的粒子数算符本征态的直接乘积,即

$$|n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle \cdots |n_\infty\rangle. \tag{1.33}$$

现在考虑这样一个问题: 能否用这些比较抽象的态矢量来改写 Schrödinger 方程? 构成下面这个态

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 n_2 \cdots n_\infty} f(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) |n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle, \tag{1.34}$$

这里认为 f 是方程 (1.15) 的展开系数的集合,且满足联立的偏微分方程组 (1.25). 在抽象的 Hilbert 空间中的这个态矢量满足微分方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 n_2 \cdots n_\infty} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) |n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle. \tag{1.35}$$

既然假定基底态矢量与时间无关,则这方程对时间的全部依赖关系都包含在系数 f 之中. 作为一个例子,请看方程 (1.25) 中的第二个动能项

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \cdots + \sum_{\substack{n_1 n_2 \cdots n_\infty \\ (\sum_i n_i = N)}} \sum_{i \neq j} \langle i|T|j\rangle f(\cdots n_i - 1 \cdots$$

---

1) 如果要求无粒子的态(或真空)是我们的态之一,则方程 (1.28) 的结果是唯一的.

$$n_j + 1\cdots, t)(n_i)^{\frac{1}{2}}$$
$$\times (n_j + 1)^{\frac{1}{2}} |n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle + \cdots. \tag{1.36}$$

这个求和中的傀指标可用下面的代换来重新标记

$$\begin{cases} n_i - 1 \equiv n_i', \quad n_j + 1 \equiv n_j', \quad n_k = n_k' \ (k \neq i \text{ 或 } j), \\ \sum_l n_l = \sum_l n_l'. \end{cases} \tag{1.37}$$

而且，带撇的占据数求和所遍及的值，可以同于原先不带撇的占据数求和所遍及的值，这是因为当 $n_j' = 0$ 和 $n_i' = -1$ 时，系数 $(n_i)^{\frac{1}{2}}(n_j + 1)^{\frac{1}{2}}$ 为零．这样，方程 (1.36) 可改写为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \cdots + \sum_{\substack{n_1' n_2' \cdots n_\infty' \\ (\sum_i n_i' = N)}} \sum_{i \neq j} \langle i|T|j\rangle$$
$$\times f(\cdots n_i' \cdots n_j' \cdots, t)(n_i' + 1)^{\frac{1}{2}}$$
$$\times (n_j')^{\frac{1}{2}} |\cdots n_i' + 1 \cdots n_j' - 1 \cdots\rangle$$
$$+ \cdots. \tag{1.38}$$

现在请注意：n_i' 值增加 1 而 n_j' 值减少 1 的态矢量，以及相乘的统计权重因子，可以简单地改写为产生和消灭算符作用于具有 n_i' 和 n_j' 值的态矢量上

$$(n_i' + 1)^{\frac{1}{2}}(n_j')^{\frac{1}{2}} |n_1' \cdots n_i' + 1 \cdots n_j' - 1 \cdots n_\infty'\rangle$$
$$= b_i^\dagger b_j |n_1' n_2' \cdots n_\infty'\rangle. \tag{1.39}$$

在这个表示式中所剩下的仅有的对占据数的依赖关系包含在系数 f 和态矢量中；因而，对占据数的求和可以完成，它给出原来用方程 (1.34) 定义的抽象态矢量 $|\Psi(t)\rangle$．于是，能量的这一项归结为如下的表示式：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \cdots + \sum_{i \neq j} \langle i|T|j\rangle$$
$$\times b_i^\dagger b_j |\Psi(t)\rangle + \cdots. \tag{1.40}$$

哈密顿函数的其它项也可用完全相同的方式处理；结果，这个

抽象的态矢量$|\Psi(t)\rangle$满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}|\Psi(t)\rangle, \tag{1.41}$$

这里用"∧"号表示在抽象的占据数 Hilbert 空间中的算符(那些显然是这样的算符,例如产生和消灭算符,就不加符号"∧"了),而哈密顿函数$\hat{H}$由下式给出

$$\hat{H}=\sum_{ij}b_i^\dagger\langle i|T|j\rangle b_j+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}b_i^\dagger b_j^\dagger\langle ij|V|kl\rangle b_l b_k. \tag{1.42}$$

在方程(1.42)中区分算符和 c 数是重要的. 例如,$\hat{H}$是这个抽象占据数空间中的算符,因为它与产生和消灭算符有关. 相反地,一次量子化的 Schrödinger 方程的单粒子态之间的动能和势能矩阵元只是一个与算符相乘的复数. 方程(1.41)和(1.42)合在一起是用二次量子化重新表述了 Schrödinger 方程,所有的统计和算符性质都包含在产生和消灭算符 $b^\dagger$ 和 b 之中. 在新的表述下,物理问题显然并未改变. 特别是系数 f 确定了一次和二次量子化之间的联系.

对于原来的含时间的多粒子 Schrödinger 方程的每一个解,存在展开系数 f 的一个集合. 给定了展开系数 f 的这个集合,如上所述就可能构成用二次量子化表出的同一问题的一个解. 反之,如果这问题已在二次量子化中解出,我们就能确定展开系数 f 的一个集合,而它就给出原来的含时间的多粒子 Schrödinger 方程的一个解.

费米子

如果在方程(1.6)中取负号,这种粒子称为费米子. 同样的一般分析也适用,只是细节稍为复杂一些,这是由于系数 C 的反对称性所涉及的负号.

$$C(\cdots E_i\cdots E_j\cdots,t)=-C(\cdots E_j\cdots E_i\cdots,t). \tag{1.43}$$

在任意两个量子数的交换下，这些 C 是反对称的，这意味着量子数 E_i 必须不等于量子数 E_j，否则系数 C 为零．这个结果表明占据数必然或是零或是一，这就是 Pauli 不相容原理的一种表述．任何系数，只要占据的态相同，就是相等的，最多相差一个负号，因而可以定义系数 $\bar{C}$

$$\bar{C}(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) \equiv C(\cdots E_i < E_j < E_k \cdots, t), \quad (1.44)$$

这里先要把系数 C 中的所有量子数按增大的次序排列．与以前完全一样，多粒子波函数可展开为

$$\Psi(x_1 \cdots x_N, t) = \sum_{n_1 \cdots n_\infty = 0}^{1} f(n_1 \cdots n_\infty, t) \times \Phi_{n_1 \cdots n_\infty}(x_1 \cdots x_N), \quad (1.45)$$

其中基底波函数 Φ 由归一化的行列式给出

$$\Phi_{n_1 \cdots n_\infty}(x_1 \cdots x_N) = \left(\frac{n_1! \cdots n_\infty!}{N!}\right)^{\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} \psi_{E_1^0}(x_1) \cdots & \psi_{E_1^0}(x_N) \\ \vdots & \\ \psi_{E_N^0}(x_1) \cdots & \psi_{E_N^0}(x_N) \end{vmatrix}. \quad (1.46)$$

这里认为占据态的单粒子量子数是按 $E_1^0 < E_2^0 \cdots < E_N^0$ 次序排列的．这些函数构成正交归一的反对称的含时间多粒子波函数的完全集合，通常称为 Slater 行列式[1]．

为方便，再次引入抽象的占据数空间，并定义

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 n_2 \cdots n_\infty} f(n_1 n_2 \cdots n_\infty, t) |n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle. \quad (1.47)$$

这里系数 f 所遵从的方程与方程(1.25)的差别仅在周相因子[见方程(1.57)]以及限制 $n_i = 0, 1$．这个限制反映了粒子的统计性质，它必须体现于抽象占据数空间中的算符中．作为方便的步骤，我们将用 Jordan 和 Wigner 的方法[2]，引入反对易定则

---

1) J. C. Slater, *Phys. Rev.*, **34**: 1293 (1929).

2) P. Jordan and E. P. Wigner, 前引文

$$\begin{cases}\{a_r, a_s^\dagger\} = \delta_{rs} & \text{(费米子)},\\ \{a_r, a_s\} = \{a_r^\dagger, a_s^\dagger\} = 0,\end{cases} \tag{1.48}$$

其中反对易式由下式定义，

$$\{A, B\} \equiv [A, B]_+ \equiv AB + BA. \tag{1.49}$$

容易看到，正是这组不同的对易定则产生正确的统计性质：

1. $a_s^2 = a_s^{\dagger 2} = 0$；因而 $a_s^\dagger a_s^\dagger|0\rangle = 0$，这制止两个粒子占据同一状态.

2. $a^\dagger a = 1 - aa^\dagger$（这里的这些算符是属于同一个模，因而略去了下标）；因此

$$\begin{aligned}(a^\dagger a)^2 &= 1 - 2aa^\dagger + aa^\dagger aa^\dagger\\ &= 1 - 2aa^\dagger + a(1 - aa^\dagger)a^\dagger\\ &= 1 - aa^\dagger\\ &= a^\dagger a\end{aligned}$$

或

$$a^\dagger a(1 - a^\dagger a) = 0. \tag{1.50}$$

最后这个关系式意味着第 s 个模的粒子数算符 $\hat{n}_s = a_s^\dagger a_s$ 具有本征值零或一，这正是所要求的. 此外，还可直截了当地证明对易式 $[\hat{n}_r, \hat{n}_s]$ 为零，虽然单个的产生和消灭算符是反对易的. 这个结果使得集合 $\{\hat{n}_r\}$ 可以同时对角化，这与占据数态矢量的定义相符合.

3. 反对易定则本身，以及总周相的选择，给出下列升和降算符

$$\begin{cases}a^\dagger|0\rangle = |1\rangle & a|1\rangle = |0\rangle\\ a^\dagger|1\rangle = 0 & a|0\rangle = 0.\end{cases} \tag{1.51}$$

反对易定则使直接乘积态 $|n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle$ 稍微复杂一些，因为必须随时留意符号. 定义

$$|n_1 n_2 \cdots n_\infty\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1}(a_2^\dagger)^{n_2}\cdots(a_\infty^\dagger)^{n_\infty}|0\rangle, \tag{1.52}$$

我们可以直接计算消灭算符 a_s 作用于这个态的效果；如 $n_s =$

1，则

$$a_s|n_1n_2\cdots n_\infty\rangle=(-1)^{S_s}(a_1^\dagger)^{n_1}\cdots \times(a_sa_s^\dagger)\cdots(a_\infty^\dagger)^{n_\infty}|0\rangle, \tag{1.53}$$

其中周相因子 S_s 定义为

$$S_s=n_1+n_2+\cdots+n_{s-1}. \tag{1.54}$$

注意，如 $n_s=0$，可以移动算符 a_s 直到作用于真空态并给出零．如果在态 n_s 里有一个粒子，方便的办法是，先用反对易关系 $a_sa_s^\dagger=1-a_s^\dagger a_s$，然后把第二项中的 a_s 作用于真空态而给出零．这样我们终于得到三个关系式

$$\begin{cases} a_s|\cdots n_s\cdots\rangle=\begin{cases}(-1)^{S_s}(n_s)^{\frac{1}{2}}|\cdots n_s-1\cdots\rangle & (\text{如 } n_s=1),\\ 0 & (\text{其它情况});\end{cases}\\ a_s^\dagger|\cdots n_s\cdots\rangle=\begin{cases}(-1)^{S_s}(n_s+1)^{\frac{1}{2}}|\cdots n_s+1\cdots\rangle & \\ & (\text{如 } n_s=0),\\ 0 & (\text{其它情况});\end{cases}\\ a_s^\dagger a_s|\cdots n_s\cdots\rangle=n_s|\cdots n_s\cdots\rangle \qquad (n_s=0,1). \end{cases} \tag{1.55}$$

第三个关系式是最有用的，因为它表明粒子数算符并不引入额外的周相．在前两个方程中用乘子 $(n_s)^{\frac{1}{2}}$ 和 $(n_s+1)^{\frac{1}{2}}$ 而不用较熟悉的记号 n_s 和 $1-n_s$，这是因为除了附加的周相因子 $(-1)^{S_s}$ 外，它们现在或者形式与以前相同，或者为零．

作为这个因子在费米子情形下所起作用的例子，考虑方程(1.4)中的动能项

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C(E_1\cdots E_N,t)=\sum_{k=1}^{N}\sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle \times C(E_1\cdots E_{k-1}WE_{k+1}\cdots E_N,t)+\cdots, \tag{1.56}$$

这里 $E_1\cdots E_N$ 是给定的量子数的集合．这些量子数可以在这个方程式的两边同时按应有的次序重新排列．不过，还有一个问题，即量子数 W 出现在右边，而 E_k 出现在左边．如把 W

移到它的应有位置上，需要附加周相因子

$$\begin{cases}(-1)^{n_W+1^{n_W+2}\cdots+n_{E_k}-1} & (W<E_k),\\ (-1)^{n_{E_k}+1^{n_{E_k}+2}\cdots+n_W-1} & (W>E_k),\end{cases} \tag{1.57}$$

它代表把W移到应有位置去的交换次数. 和前面一样，现在我们转到 f 系数，并且再次改换变量. 例如，考虑动能项部分

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \cdots + \sum_{n'_1n'_2\cdots n'_\infty}\sum_{i<j}\langle i|T|j\rangle \\ \times f(\cdots n'_i\cdots n'_j\cdots,t)(n'_i+1)^{\frac{1}{2}}(n'_j)^{\frac{1}{2}}\delta_{n'_i0}\delta_{n'_j1} \\ \times(-1)^{n'_{i+1}+n'_{i+2}\cdots+n'_{j-1}}|\cdots n'_i+1 \\ \cdots n'_j-1\cdots\rangle+\cdots. \end{aligned} \tag{1.58}$$

注意在这个表示式中出现的周相因子等价于$(-1)^{s_j-s_i-n'_i}$；此外，只有 $n'_i=0$ 而 $n'_j=1$ 时这一项才有贡献，因而这个周相因子就是 $(-1)^{s_j-s_i}$. 方程 (1.55) 使我们可以把有关的因子改写为

$$\begin{aligned} &\delta_{n'_i0}\delta_{n'_j1}(n'_i+1)^{\frac{1}{2}}(n'_j)^{\frac{1}{2}}(-1)^{s_j-s_i}|\cdots n'_i+1\cdots n'_j-1\cdots\rangle \\ &\quad = a_i^\dagger a_j|n'_1\cdots n'_\infty\rangle, \end{aligned} \tag{1.59}$$

这显示了用反对易定则定义的产生和消灭算符确实具有所要求的性质.按这种方式，可将 Schrödinger 方程再次用二次量子化表示为下列形式

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}|\Psi\rangle, \\ \hat{H}=\displaystyle\sum_{rs}a_r^\dagger\langle r|T|s\rangle a_s+\frac{1}{2}\sum_{rstu}a_r^\dagger a_s^\dagger \\ \quad\times\langle rs|V|tu\rangle a_u a_t. \end{cases} \tag{1.60}$$

特别要注意哈密顿函数的最后两个消灭算符的次序，这与势能矩阵元的末了两个单粒子波函数的次序相反（读者务必自己详细验算一下）. 当然，在玻色子的情形，这个次序是没有影响的，因为最后两个消灭算符可相互对易；但是对于费米

子，这个次序影响总的符号．完全同前面一样，方程(1.60)完全等价于按一次量子化表示的 Schrödinger 方程，但是展开系数的反对称性所引起的周相已并入到哈密顿函数和直接乘积态矢量中去了．

2. 场

组成产生和消灭算符(为了一般性，这里记作 $c^\dagger$ 和 c)的线性组合

$$\begin{cases} \hat{\phi}(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x}) c_k, \\ \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x}) c_k^\dagger \end{cases} \tag{2.1}$$

常常是方便的，这里的系数是单粒子波函数，而求和则遍及于单粒子量子数的完全集合．特定地说，对于自旋 1/2 的费米子，指标 k 可以表示量子数 $\{\mathbf{k}, s_z\}$ 或 $\{E, L, J, M\}$ 的集合，而对应的波函数有两个分量

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \psi_k(\mathbf{x})_1 \\ \psi_k(\mathbf{x})_2 \end{bmatrix} \equiv \psi_k(\mathbf{x})_\alpha \quad (\alpha = 1, 2). \tag{2.2}$$

量 $\hat{\phi}$ 和 $\hat{\phi}^\dagger$ 称为场算符．它们是抽象的占据数 Hilbert 空间中的算符，这是因为它们依赖于产生和消灭算符．这些场算符满足简单的对易或反对易关系则视其统计性质而定，

$$\begin{cases} [\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\phi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}')]_\mp = \sum_k \psi_k(\mathbf{x})_\alpha \psi_k(\mathbf{x}')^*_\beta & (2.3\,\text{a}) \\ \qquad\qquad = \delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ [\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\phi}_\beta(\mathbf{x}')]_\mp = [\hat{\phi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\phi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}')]_\mp = 0, & (2.3\,\text{b}) \end{cases}$$

其中上面（下面）的符号属于玻色子（费米子）．这里方程(2.3 a)中第一个等号是从产生和消灭算符的对易或反对易关系得到的，而第二个等号则根据单粒子波函数的完全性．

哈密顿算符可用场算符改写如下：

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) T(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \iint d^3x d^3x' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x},\mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}). \quad (2.4)$$

这个表示式是容易验证的，因为对空间坐标的积分给出单粒子动能和势能的矩阵元，剩下的是这些矩阵元乘以一定的产生和消灭算符再求和．如粒子自旋为1/2，那还隐含着附加一个自旋空间中的矩阵元．请留心注意势能中最后二个场算符次序，这次序与前面指出的相一致并保证了 $\hat{H}$ 是厄密的．哈密顿函数的上述形式指出了二次量子化这个名称的来由，因为上式看起来好象是哈密顿函数在波函数之间的期待值．但是，量 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^\dagger$ 并不是波函数而是场算符；这样，按二次量子化表示，场是算符，而势能和动能则是一个复系数．

根据上述分析，对其它算符的推广现在是很清楚的了．例如，考虑一般的单体算符，按一次量子化形式写出是

$$J = \sum_{i=1}^{N} J(\mathbf{x}_i). \quad (2.5)$$

相应的二次量子化算符由下式给出

$$\begin{aligned} \hat{J} &= \sum_{rs} \langle r | J | s \rangle c_r^\dagger c_s \\ &= \int d^3x \sum_{rs} \psi_r(\mathbf{x})^\dagger J(\mathbf{x}) \psi_s(\mathbf{x}) c_r^\dagger c_s \\ &= \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) J(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.6)$$

这里最后一个形式特别有用．特别是粒子数密度算符

$$n(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (2.7)$$

成为

$$\hat{n}(\mathbf{x}) = \sum_{rs} \psi_r(\mathbf{x})^\dagger \psi_s(\mathbf{x}) c_r^\dagger c_s = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x}), \qquad (2.8)$$

而总粒子数算符由于单粒子波函数的正交归一性而具有如下简单的形式

$$\hat{N} = \int d^3x \hat{n}(\mathbf{x}) = \sum_r c_r^\dagger c_r = \sum_r \hat{n}_r$$

$$= \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x}). \qquad (2.9)$$

利用产生和消灭算符的对易定则或利用场算符的对易定则都能验证，粒子数算符与方程 (2.4) 表示的哈密顿算符可对易。这个结果在物理上是明显的，因为通常的 Schrödinger 哈密顿函数并不改变总粒子数. 因而可推断 $\hat{N}$ 是个运动常数，可与哈密顿函数同时对角化. 这样，抽象 Hilbert 空间中的问题就分为一系列子空间中的问题，这些子空间与固定的总粒子数相对应. 不过，抽象 Hilbert 空间包含着具有任意粒子数的态.

3. 例：简并电子气体

为了举例说明二次量子化的效用，我们考虑一个简单的模型，这模型提供金属或等离子体的一级近似. 这个系统是处于均匀分布的正电荷背景中的相互作用的电子气体，选定正电背景是为了保证整个系统是电中性的. 当然，在实际的金属或等离子体中，正电荷定域在离子实中，离子实的运动也必须包括在计算中. 但是这些正离子比电子重得多，可以完全忽略离子的运动. 然而，均匀正电背景的假设又太过份了；正因为这样，这里的模型只能提供实际金属的定性说明.

我们感兴趣的是大块介质的性质，因此，用边长为 L 的大立方箱子把系统包围起来将是方便的；在计算终结时再取极

限 $L \to \infty$. 在无限大的均匀介质中，所有的物理性质在空间平移下必然不变；这个性质提示了单粒子波函数的周期性边界条件，从而单粒子波函数就成为平面波态

$$\psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) = V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \eta_\lambda. \tag{3.1}$$

这里 $V(\equiv L^3)$ 是箱子的体积，而 η_λ 是自旋沿选定的 z 轴向上或向下的两个自旋波函数

$$\eta_\uparrow = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \eta_\downarrow = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

周期性边界条件决定了容许的波数为

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L} \quad (i = x, y, z \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots). \tag{3.2}$$

总的哈密顿函数可写为三项之和

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b}, \tag{3.3}$$

其中

$$H_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j}^{N} \frac{e^{-\mu|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \tag{3.4}$$

是电子的哈密顿函数，

$$H_b = \frac{1}{2} e^2 \iint d^3x d^3x' \frac{n(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}') e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \tag{3.5}$$

是正电背景的能量，$n(\mathbf{x})$ 是正电背景的粒子密度，

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^{N} \int d^3x \frac{n(\mathbf{x}) e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|} \tag{3.6}$$

是电子与正电背景的相互作用能量. 为了使积分有意义，我们加入了一个指数式收敛因子，而在最后使 μ 为零. 由于库仑相互作用是长程的，在“热力学极限”即 $N \to \infty$, $V \to \infty$, 而 $N/V = n$ 是常数的极限下，方程(3.3)中的三项各自分别发散. 然而，整个系统是电中性的，因而在这个极限下这三项之和必须保持为有意义的. 收敛因子 μ 的存在就保证了这表

示式在每一步都是数学上有确定意义的，并使我们得以把这种抵消显示出来．由于我们感兴趣的是中性介质的大块性质，例如 E/N（这仅与 n 有关），因此我们取极限的次序是先令 $L \to \infty$，然后令 $\mu \to 0$．或者等价地，在计算中每一步都认为 $\mu^{-1} \ll L$；这就使我们可以随意移动积分原点，只除了表面改正，而这改正在这种极限中是可以忽略的．

因为正电背景惯性很大，方程(3.3)中的仅有的动力学变量都是属于电子的．这样，H_b 是纯 c 数，而且对于均匀分布 $n(\mathbf{x}) = N/V$，H_b 是容易算出的：

$$\begin{aligned} H_b &= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \iiint d^3x d^3x' \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \\ &= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \int d^3z \frac{e^{-\mu z}}{z} \\ &= \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \end{aligned} \tag{3.7}$$

这里在第二行曾利用了平移不变性以改变积分原点．由于库仑势是长程的，每个电荷元对任何另一个电荷元都有相互作用，所以量 $N^{-1}H_b$ 在 $\mu \to 0$ 的极限下是发散的．

原则上，H_{el-b} 是单粒子算符，因为它作用在各个电子上．但是对这里的系统，可以再次利用平移不变性而写出

$$\begin{aligned} H_{el-b} &= -e^2 \sum_{i=1}^{N} \frac{N}{V} \int d^3x \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|} \\ &= -e^2 \sum_{i=1}^{N} \frac{N}{V} \int d^3z \frac{e^{-\mu z}}{z} \\ &= -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}, \end{aligned} \tag{3.8}$$

这表明，H_{el-b} 事实上是一个 c 数．因此，总哈密顿函数归结为

$$H = -\frac{1}{2}e^2N^2V^{-1}4\pi\mu^{-2} + H_{el}, \tag{3.9}$$

而所有有意义的物理效应都包含在 H_{el} 中. 现在我们按二次量子化改写方程 (3.9). 动能项需要矩阵元

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}_1\lambda_1 | T | \mathbf{k}_2\lambda_2\rangle &= (2mV)^{-1}\int d^3x e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}}\eta^{\dagger}_{\lambda_1}(-\hbar^2\nabla^2)e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}}\eta_{\lambda_2}\\ &= \frac{\hbar^2k_2^2}{2mV}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\int d^3x e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{x}}\\ &= \frac{\hbar^2k_2^2}{2m}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2},\end{aligned} \tag{3.10}$$

这里用了通常的 Kronecker δ 的定义

$$\int d^3x e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{x}} = V\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}. \tag{3.11}$$

动能算符成为

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}\lambda}\frac{\hbar^2k^2}{2m}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}, \tag{3.12}$$

它可解释为每个模的动能乘以相应的粒子数算符. 对于势能,需要计算较复杂的矩阵元如下,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2 | V | \mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4\rangle &= \frac{e^2}{V^2}\iint d^3x_1 d^3x_2 e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}_1}\eta_{\lambda_1}(1)^{\dagger}\\ &\quad\times e^{-i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}_2}\eta_{\lambda_2}(2)^{\dagger}\frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|}}{|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|}\\ &\quad\times e^{i\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{x}_1}\eta_{\lambda_3}(1)e^{i\mathbf{k}_4\cdot\mathbf{x}_2}\eta_{\lambda_4}(2).\end{aligned} \tag{3.13}$$

作代换 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_2$ 和 $\mathbf{y} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$, 这表示式就化为

$$\begin{aligned}&\langle \mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2 | V | \mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4\rangle\\ &= \frac{e^2}{V^2}\int d^3x e^{-i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{x}}\\ &\quad\times\int d^3y e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{y}}\frac{e^{-\mu y}}{y}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\end{aligned}$$

$$= \frac{e^2}{V}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}\frac{4\pi}{(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)^2+\mu^2}, \quad (3.14)$$

这里自旋指标的 Kronecker δ 是由自旋波函数的正交性得来的. 我们还再次移动了积分原点，而最后一个 Kronecker δ 表示均匀系统中的动量守恒. 总的哈密顿函数现在可改写为

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{e^2N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} + \sum_{\mathbf{k}\lambda}\frac{\hbar^2k^2}{2m}a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{e^2}{2V}$$
$$\times \sum_{\mathbf{k}_1\lambda_1}\sum_{\mathbf{k}_2\lambda_2}\sum_{\mathbf{k}_3\lambda_3}\sum_{\mathbf{k}_4\lambda_4}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$$
$$\times \frac{4\pi}{(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)^2+\mu^2}a^\dagger_{\mathbf{k}_1\lambda_1}a^\dagger_{\mathbf{k}_2\lambda_2}a_{\mathbf{k}_4\lambda_4}a_{\mathbf{k}_3\lambda_3}. \quad (3.15)$$

由于系统是电中性的，我们就可能从哈密顿函数中消除 μ，我们马上就要证明这点. 动量守恒实际上限制了对 $\{\mathbf{k}_i\}$ 的求和只有三个独立变量而不是四个. 变量代换

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}+\mathbf{q}, \qquad \mathbf{k}_3 = \mathbf{k},$$
$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{p}-\mathbf{q}, \qquad \mathbf{k}_4 = \mathbf{p}$$

保证 $\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4$，而且还可得出 $\hbar(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3) = \hbar\mathbf{q}$ 是两粒子相互作用中的动量转移. 用这些新变量，方程(3.15)的最后一项成为

$$\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{kpq}}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2+\mu^2}a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}, \quad (3.16)$$

这里自旋求和中的两个已用 Kronecker δ 算出. 将方程(3.16)分成两项，分别属于 $\mathbf{q}\neq 0$ 和 $\mathbf{q}=0$，

$$\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{kpq}}{}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2+\mu^2}a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}$$
$$+\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{kp}}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{\mu^2}a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda_1}a^\dagger_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}, \quad (3.17)$$

这将是方便的，式中第一个求和号旁的一撇的意思是，除去

$\mathbf{q}=0$ 的项. 第二个求和可用反对易关系改写成

$$\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}\sum_{\mathbf{k}\lambda_1}\sum_{\mathbf{p}\lambda_2}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda_1}a_{\mathbf{k}\lambda_1}(a^{\dagger}_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}-\delta_{\mathbf{kp}}\delta_{\lambda_1\lambda_2})$$
$$=\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}(\hat{N}^2-\hat{N}),$$

这里用了方程 (2.9) 以得出 $\hat{N}$. 由于我们总是处理N固定的态，算符$\hat{N}$可用它的本征值N代替，从而对哈密顿函数的贡献为 c 数，

$$\frac{e^2}{2}\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}-\frac{e^2}{2}\frac{N}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}. \tag{3.18}$$

显然，方程 (3.18) 第一项与方程 (3.15) 第一项相消. 而方程 (3.18) 第二项表示每个粒子有 $-\frac{1}{2}4\pi e^2(V\mu^2)^{-1}$ 的能量，在原先讨论的物理极限下，即先令 $L\to\infty$，然后令 $\mu\to 0$ (始终保持 $\mu^{-1}\ll L$)，这能量成为零. 这样，μ^{-2} 的显式发散性，在热力学极限下完全地抵消了，这反映了整个系统的电中性；此外，现在已容许在方程 (3.17) 的第一项中令 $\mu=0$，因为这样得到的表示式是完全确定的. 因此我们得到在均匀正电背景中宏观电子气体的最终哈密顿函数是

$$\hat{H}=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\frac{\hbar^2k^2}{2m}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}$$
$$+\frac{e^2}{2V}{\sum_{\mathbf{kpq}}}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}, \tag{3.19}$$

这里不用说已隐含地假设了 $N\to\infty$，$V\to\infty$，$N/V=n=$常数.

为了方便，现在引入无量纲变量. 我们先用每个粒子的体积来定义一个长度 r_0:

$$V=\frac{4}{3}\pi r_0^3N, \tag{3.20}$$

r_0 实质上是粒子间距. 库仑作用提供了第二个长度，即 Bohr 半径:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \tag{3.21}$$

这两个量之比是无量纲的，

$$r_s = \frac{r_0}{a_0}, \tag{3.22}$$

它显然表征系统的密度. 用 r_0 作为长度单位，定义下列各量

$$\bar{V} = r_0^{-3}V, \quad \bar{\mathbf{k}} = r_0\mathbf{k}, \quad \bar{\mathbf{p}} = r_0\mathbf{p}, \quad \bar{\mathbf{q}} = r_0\mathbf{q}. \tag{3.23}$$

并得到方程 (3.19) 的无量纲形式

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2}\left(\sum_{\bar{\mathbf{k}}\lambda}\frac{1}{2}\bar{k}^2 a^\dagger_{\bar{\mathbf{k}}\lambda}a_{\bar{\mathbf{k}}\lambda} + \frac{r_s}{2\bar{V}}\sum_{\bar{\mathbf{k}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{q}}}{}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{\bar{q}^2}a^\dagger_{\bar{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{q}},\lambda_1}a^\dagger_{\bar{\mathbf{p}}-\bar{\mathbf{q}},\lambda_2}a_{\bar{\mathbf{p}}\lambda_2}a_{\bar{\mathbf{k}}\lambda_1}\right). \tag{3.24}$$

这是一个重要结果，因为它说明，在高密度极限 ($r_0 \to 0$) 下，随着 $r_s \to 0$，势能成为一个小的微扰. 这样，高密度电子气体的相互作用能的首项，可用第一级微扰论得出，即使这个势能既不太弱也不是短程的. 人们或许预期基态能量可用小参数 r_s 的幂级数展开式表示，但事实上，第二级项是对数发散的 (见习题 1.4 和 1.5). 这级数形式不是 r_s 的幂级数而是

$$E = \frac{Ne^2}{a_0 r_s^2}(a + br_s + cr_s^2\ln r_s + dr_s^2 + \cdots)$$

其中 a、b、c、$d\cdots$ 是数字常数. 现在我们来计算 a 和 b，至于 c 可从习题 1.5 推出. 系数 c 以及高级系数的恰当的计算是十分困难的，它需要第三章到第五章中所发展的更精致的技术.

在高密度极限，根据上述讨论可将原先的有量纲的哈密顿函数 [方程 (3.19)] 分成两部分:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}, \tag{3.25 a}$$

$$\hat{H}_1 = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{kpq}}{}' \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1} a^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2} a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}, \tag{3.25 b}$$

这里 $\hat{H}_0$ 是无微扰哈密顿函数，它表示没有相互作用的 Fermi 系统，而 $\hat{H}_1$ 是（小的）微扰. 相应地，基态能量 E 可以写为 $E^{(0)} + E^{(1)} + \cdots$，这里 $E^{(0)}$ 是自由 Fermi 气体的基态能量，而 $E^{(1)}$ 是一级能量移动. 在每一个动量本征态上 Pauli 不相容原理只容许有两个费米子，一个自旋向上，一个自旋向下，所以归一化的基态 $|F\rangle$ 是将直到最大动量值的所有动量态填满，最大值即 Fermi 动量 $P_F = \hbar k_F$. 在系统的体积变为无限大的极限下，对态的求和可以按照下列熟知的关系式用积分来代替，

$$\sum_{\mathbf{k}\lambda} f_\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{n_x n_y n_z} \sum_\lambda f_\lambda\left(\frac{2\pi \mathbf{n}}{L}\right)_{L\to\infty} \to$$

$$\iiint dn_x dn_y dn_z \sum_\lambda f_\lambda\left(\frac{2\pi \mathbf{n}}{L}\right)$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_\lambda \int d^3k f_\lambda(\mathbf{k}). \tag{3.26}$$

这里用了方程（3.2）把对动量求和转换为对表征波数的整数 n 求和. L 非常大时，各个整数增加或减少一引起函数 f 的变化很慢，所以 n_x、n_y 和 n_z 可以当作连续变量. 最后，方程（3.2）又使我们可以把变量 $\{n_i\}$ 换成 $\{k_i\}$，使之成为一个对波数的积分.

计算粒子数算符在基态 $|F\rangle$ 的期待值，可以求得最大的波数 k_F. 因为

$$N = \langle F|\hat{N}|F\rangle$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \langle F|\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}|F\rangle = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \theta(k_F - k)$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\lambda}\int d^3k\theta(k_F-k)$$

$$= (3\pi^2)^{-1}Vk_F^3 = N, \tag{3.27}$$

这里 $\theta(x)$ 表示阶跃函数

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & (x>0), \\ 0 & (x<0). \end{cases} \tag{3.28}$$

Fermi 波数 k_F 和粒子密度 $n = N/V$ 之间的这个重要关系式以后将反复地用到;另一个形式

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} r_0^{-1} \approx 1.92 r_0^{-1} \tag{3.29}$$

表明 k_F^{-1} 与粒子间距是可比拟的. $\hat{H}_0$ 的期待值可按同样方式算出

$$E^{(0)} = \langle F|\hat{H}_0|F\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\mathbf{k}\lambda} k^2\langle F|\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}|F\rangle$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\mathbf{k}\lambda} k^2\theta(k_F-k)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\lambda} V(2\pi)^{-3}\int d^3k k^2\theta(k_F-k)$$

$$= \frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}N = \frac{e^2}{2a_0}\frac{N}{r_s^2}\frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}}$$

$$= \frac{e^2}{2a_0}N\frac{2.21}{r_s^2}. \tag{3.30}$$

在自由 Fermi 气体中,每个粒子的基态能量 $E^{(0)}/N$ 是 Fermi 能 $\varepsilon_F^0 = \hbar^2k_F^2/2m$ 的 3/5 倍,换一个写法,$E^{(0)}/N$ 可表示为 $2.21\, r_s^{-2}$ 里德伯(ry),1 里德伯$= e^2/2a_0 \approx 13.6$ 电子伏特 (ev) 是氢原子基态束缚能.

现在计算第一级能量移动

$$E^{(1)} = \langle F|\hat{H}_1|F\rangle$$

$$= \frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{kpq}}{}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}\langle F|a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}a_{\mathbf{p}\lambda_2}a_{\mathbf{k}\lambda_1}|F\rangle. \tag{3.31}$$

这个矩阵元容易如下分析：在基态$|F\rangle$中，态$\mathbf{p}\lambda_2$和$\mathbf{k}\lambda_1$必须被占据，否则消灭算符作用于右边给出零．同样，在$|F\rangle$中，态$\mathbf{k}+\mathbf{q}$，λ_1和$\mathbf{p}-\mathbf{q}$，λ_2也必须被占据着，否则算符$a^\dagger$作用于左边也将为零．最后，矩阵元两边应出现同样的态，这要求两个产生算符填满两个消灭算符引起的空穴．因此，这些算符必须配成对，这只有两种可能性：

$$\begin{cases}\mathbf{k}+\mathbf{q}, & \lambda_1=\mathbf{k}\lambda_1,\\ \mathbf{p}-\mathbf{q}, & \lambda_2=\mathbf{p}\lambda_2,\end{cases}\quad\text{或}\quad\begin{cases}\mathbf{k}+\mathbf{q}, & \lambda_1=\mathbf{p}\lambda_2,\\ \mathbf{p}-\mathbf{q}, & \lambda_2=\mathbf{k}\lambda_1.\end{cases}\tag{3.32}$$

这里第一种配对是被禁止的，因为在求和中排除了$\mathbf{q}=0$项．于是，矩阵元成为

$$\begin{aligned}&\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\langle F|a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda_1}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}a_{\mathbf{k}\lambda_1}|F\rangle\\&\quad=-\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\langle F|\hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda_1}|F\rangle\\&\quad=-\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\theta(k_F-|\mathbf{k}+\mathbf{q}|)\theta(k_F-k).\end{aligned}\tag{3.33}$$

方程(3.31)和(3.33)相结合给出

$$\begin{aligned}E^{(1)}&=-\frac{e^2}{2V}\sum_{\lambda_1}\sum_{\mathbf{kq}}{}'\frac{4\pi}{q^2}\theta(k_F-|\mathbf{k}+\mathbf{q}|)\theta(k_F-k)\\&=-\frac{e^2}{2}\frac{4\pi V}{(2\pi)^6}2\int d^3kd^3qq^{-2}\theta(k_F-|\mathbf{k}+\mathbf{q}|)\\&\quad\times\theta(k_F-k),\end{aligned}\tag{3.34}$$

这里因子2来自对自旋求和，而$\mathbf{q}\neq0$的限制现在也可略去，因为它仅在一点影响被积函数．为方便，把变量从$\mathbf{k}$变换到$\mathbf{P}=\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{q}$，这样方程(3.34)化为对称形式

$$\begin{aligned}E^{(1)}=&-4\pi e^2V(2\pi)^{-6}\int d^3qq^{-2}\\&\times\int d^3P\theta\left(k_F-\left|\mathbf{P}+\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|\right)\\&\times\theta\left(k_F-\left|\mathbf{P}-\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|\right).\end{aligned}$$

对$\mathbf{P}$的积分区域见图3.1. 两个粒子都在 Fermi 海内，因此 $\left|\mathbf{P}+\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|$和$\left|\mathbf{P}-\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|$ 都必须小于k_F. 这个体积的计算

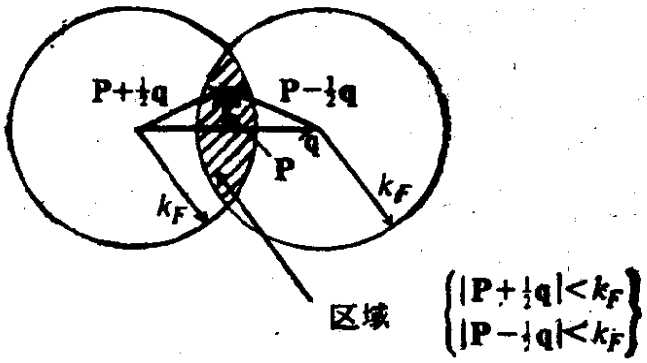


图 3.1　动量空间中计算$E^{(1)}$的积分区域.

是简单的几何问题，其结果

$$\int d^3P\theta\left(k_F-\left|\mathbf{P}+\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|\right)\theta\left(k_F-\left|\mathbf{P}-\frac{1}{2}\mathbf{q}\right|\right)$$
$$=\frac{4\pi}{3}k_F^3\left(1-\frac{3}{2}x+\frac{1}{2}x^3\right)\theta(1-x)$$
$$\left(x=\frac{q}{2k_F}\right). \tag{3.35}$$

余下的计算都是初等的，我们求得

$$E^{(1)}=-4\pi e^2V(2\pi)^{-6}\frac{4}{3}\pi k_F^3 2k_F\int_0^1 dx 4\pi\left(1-\frac{3}{2}x+\frac{1}{2}x^3\right)$$
$$=-\frac{e^2}{2a_0}\frac{N}{r_s}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{3}{2\pi}=-\frac{e^2}{2a_0}N\frac{0.916}{r_s}. \tag{3.36}$$

这样，在高密度极限下，每个粒子的基态能量近似由下式给出

$$\frac{E}{N}_{r_s\to 0}=\frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{2.21}{r_s^2}-\frac{0.916}{r_s}+\cdots\right]. \tag{3.37}$$

注意每个粒子的能量是有限的，这表明总能量是广延量. 方程(3.37)的第一项简单地是 Fermi 电子气体的动能；当 $r_s\to 0$，也就是在非常高密度极限下，它成为主要项. 第二项通常

称为交换能，并且是负的．它的来源是由于波函数的反对称性，因而方程 (3.31) 中的矩阵元的计算包含两项：直接项和交换项．如我们所看到，直接项来源于相互作用的 $\mathbf{q} = 0$ 的部分，并起着抵消 $H_b + H_{el-b}$ 的作用．这个抵消导致限制 $\mathbf{q} \neq 0$，并反映着系统的电中性．抵消后剩下的只有（负的）交换能．在这个级数中其余的项(用…表示的)称为相关能[1]，我们将在第 12 节和第 30 节中回过来讨论这个问题，相关能的首项将在那里明显地计算出来．

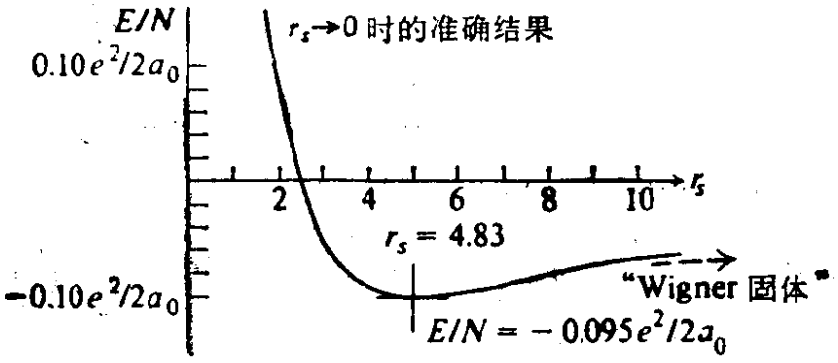


图 3.2 均匀正电背景中电子气体的近似基态能量
[方程 (3.37) 中的头两项].

但是，目前有意义的是，考虑方程 (3.37) 的头两项作为 r_s 的函数(图 3.2)．交换能的相吸引的符号保证这能量曲线有一个负值的极小；因此系统处于束缚态．随着 $r_s \to 0$ (高密度极限)，方程 (3.37) 表示这问题的准确解．对于较大的 r_s，这个解只是近似的，但是我们可以应用熟知的 Rayleigh-Ritz 变分原理，它断言量子力学系统的准确的基态能量总是低于总哈密顿函数在任何一个归一化的态求得的期待值．这个原理的条件显然是满足的，因为我们现在只不过是计算哈密顿函数 $\hat{H}$ 在态 $|F\rangle$ 的期待值．由此可见，我们的这个模型的准确解也必然代表一个束缚系统，其能量低于图 3.2 的曲线．方程

1) E. P. Wigner, *Phys. Rev.*, **46**: 1002 (1934.)

(3.37) 的极小值出现在

$$(r_s)_{\min} = 4.83, \quad \left(\frac{E}{N}\right)_{\min} = -0.095\frac{e^2}{2a_0}. \tag{3.38}$$

虽然没有理由期望我们的解在上述范围内还是正确的，但是，有趣的是注意数值

$$r_s = 4.83 \qquad \frac{E}{N} = -1.29\text{eV} \quad (\text{在极小}) \tag{3.39}$$

与实验室条件下所测得的金属钠的实验值相当符合[1)]

$$r_s = 3.96 \qquad \frac{E}{N} = -1.13\text{eV} \quad (\text{Na 的实验值}) \tag{3.40}$$

这里的结合能就是金属的汽化热. 这样，这个非常简单的模型能够解释金属结合能的绝大部分. 在实际金属中，我们还必须进一步把正电背景定域在晶体点阵的位置上，如 Wigner 和 Seitz 所首先讨论的[2)3)].

还值得指出的是方程(3.37)也可用来计算电子气体的热力学性质. 压强是

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N = -\frac{dE}{dr_s}\frac{dr_s}{dV}$$

$$= \frac{Ne^2}{2a_0}\frac{r_s}{3V}\left[\frac{2(2.21)}{r_s^3} - \frac{0.916}{r_s^2}\right]. \tag{3.41}$$

在点 $r_s = 4.83$，压强消失，系统处于平衡. 此外，体积弹性模量

$$B = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_N = \frac{Ne^2}{2a_0}\frac{2}{9V}\left[\frac{5(2.21)}{r_s^2} - \frac{2(0.916)}{r_s}\right] \tag{3.42}$$

在较高的 $r_s = 6.03$ 时为零，此时在这近似下，系统不再处于

---

1) 例如见 C. Kittel, "Quantum Theory of Solids", p. 115, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1963.

2) E. P. Wigner and F. Seitz, *Phys Rev.*, **43**: 804 (1933); **46**: 509 (1934).

3) 有关的改正的近代解说见 C. Kittel, 前引书 pp. 93—94, 115.

亚稳态.

在低密度极限 ($r_s \to \infty$)，Wigner[1] 曾经证明：只要允许电子"结晶"为"Wigner 固体"，系统的能量可以更低. 这种情况之所以产生是由于与电子的定域化相联系的零点动能与经典点阵的静电能相比终于变为可以忽略. Wigner 证明了这种固体中每个粒子的能量的渐近表示式

$$\frac{E}{N}\underset{r_s\to\infty}{=}\frac{e}{2a_0}\left[-\frac{1.79}{r_s}+\frac{2.66}{r_s^{\frac{3}{2}}}+\cdots\right] \quad (\text{"Wigner 固体"}), \tag{3.43}$$

并且这个表示式给出的能量显然比方程(3.37)给出的能量值为低. 低密度极限[方程 (3.43)] 大致的图形如图 3.2 中点线所示. 变分原理保证，在 $r_s \to \infty$ 时，Wigner 固体代表一个较好的波函数，因为它具有更低的能量.

习　　题

1.1　试证明：粒子数算符 $\hat{N}=\int\hat{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x})\hat{\phi}(\mathbf{x})d^3x$ 与方程(1.42)和(1.62)的哈密顿算符可对易.

1.2　给定一个自旋 1/2 的粒子的均匀系，这些粒子通过势 V 而相互作用.

(a) 试证，哈密顿函数在无相互作用基态的期待值是

$$E^{(0)}+E^{(1)}=2\sum_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}_F}\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\lambda}^{\mathbf{k}_F}\sum_{\mathbf{k}'\lambda'}^{\mathbf{k}_F}\{\langle\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}'\lambda'|V|\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}'\lambda'\rangle-\langle\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}'\lambda'|V|\mathbf{k}'\lambda'\mathbf{k}\lambda\rangle\},$$

其中 λ 是自旋的 z 分量.

(b) 假设 V 是有心的且与自旋无关. 如果对一切 $|\mathbf{x}_1-$

---

1) E. P. Wigner, *Trans. Farad. Soc.*, **34**: 678 (1933); W. J. Carr, Jr, *Phys. Rev.*, **122**: 1437 (1961).

$\mathbf{x}_2|$ 都有 $V(|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|)<0$，且 $\int|V(x)|d^3x<\infty$，试证，此系统将坍塌．（提示：从作为密度的函数的 $(E^{(0)}+E^{(1)})/N$ 出发．）

1.3 给定一个自旋为 0 的粒子的均匀系，这些粒子通过势 V 而相互作用．

(a) 试证，哈密顿函数在无相互作用基态的期待值是 $E^{(1)}/N=(N-1)V(0)/2V\approx\frac{1}{2}nV(0)$，其中

$$V(\mathbf{q})=\int d^3xV(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\quad\text{且}\quad V(0)\text{ 表示 }V(\mathbf{q}=0)$$

(b) 重作习题 1.2 (b)

(c) 证明[1]，对基态能量的第二级贡献是

$$\frac{E^{(2)}}{N}=-\frac{N-1}{2V}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{|V(\mathbf{q})|^2}{\hbar^2\mathbf{q}^2/m}$$

$$\approx-\frac{n}{2}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{|V(\mathbf{q})|^2}{\hbar^2\mathbf{q}^2/m}.$$

1.4 试证，对电子气体基态能量的第二级贡献是 $E^{(2)}=(Ne^2/2a_0)(\epsilon_2^r+\epsilon_2^b)$，其中

$$\epsilon_2^r=-\frac{3}{8\pi^5}\int\frac{d^3q}{q^4}\int_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|>1}d^3k$$

$$\times\int_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|>1}d^3p\,\frac{\theta(1-k)\theta(1-p)}{\mathbf{q}^2+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{k}+\mathbf{p})},$$

---

1) 用标准的第二级微扰论：如 $H=H_0+H_1$，而无微扰本征矢 $|j\rangle$ 满足 $H_0|j\rangle=E_j|j\rangle$，则

$$E^{(2)}=\sum_{j\neq0}\frac{|\langle0|H_1|j\rangle|^2}{E_0-E_j}=\left\langle0\left|H_1\frac{P}{E_0-H_0}H_1\right|0\right\rangle$$

其中 $|0\rangle$ 是 H_0 的基态本征矢，其能量为 E_0，而 $P=1-|0\rangle\langle0|$ 是在激发态上的投影算符．

$$\varepsilon_2^b = \frac{3}{16\pi^5}\int\frac{d^3q}{q^2}\int_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|>1}d^3k\int_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|>1}d^3p$$
$$\times\frac{\theta(1-k)\theta(1-p)}{(\mathbf{q}+\mathbf{k}+\mathbf{p})^2[\mathbf{q}^2+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{k}+\mathbf{p})]}.$$

1.5 习题1.4中的交换项ε_2^b是有限的，而直接项ε_2^r发散.

(a) 考虑函数$f(q)$，其定义为

$$f(q)=\int_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|>1}d^3k\int_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|>1}d^3p\,\frac{\theta(1-k)\theta(1-p)}{\mathbf{q}^2+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{k}+\mathbf{p})}.$$

试证，当$q\to\infty$，$f(q)\approx(4\pi/3)^2q^{-2}$，而当$q\to 0$，$f(q)\approx\frac{2}{3}(2\pi)^2(1-\ln 2)q$. 由此推断$\varepsilon_2^r=-(3/8\pi^5)\int d^3qf(q)q^{-4}$对于小$q$作对数式发散.

(b) 由于介入的介质的极化，改变了两个电子之间的长波有效相互作用，当$q\to 0$时，其行为有如

$$V(q)_{\text{eff}}\approx 4\pi e^2[\mathbf{q}^2+(4r_s/\pi)k_F^2(4/9\pi)^{\frac{1}{3}}]^{-1}.$$

[见方程(12.65)]. 在$r_s\to 0$的极限下，用这个结果说明

$$\varepsilon_2^r=2\pi^{-2}(1-\ln 2)\ln r_s+\text{常数}=0.0622\cdot\ln r_s+\text{常数}.$$

(c) 在(b)部分的ε_2^r怎样影响物态方程？试求出压缩系数变为负值时的密度.

1.6 考虑一个极化电子气体，用$N_\pm$表示其中自旋向上(向下)的电子数[1].

(a) 试求出作为$N=N_++N_-$和极化度$\zeta=(N_+-N_-)/N$的函数的基态能量(到相互作用势的第一级).

(b) 试证明，当$r_s>(2\pi/5)(9\pi/4)^{\frac{1}{3}}(2^{\frac{1}{3}}+1)=5.45$时，铁磁态($\zeta=1$)较无磁化态($\zeta=0$)的能量低，试解释为什么是这样的.

(c) 试证，当$r_s>(3\pi^2/2)^{\frac{2}{3}}=6.03$时，

---

1) F. Bloch, *Z.Physik*, **57**: 545 (1929).

$\partial^2(E/N)/\partial\zeta^2|_{\zeta=0}$ 变为负的.

(d) 试讨论这两个临界密度的物理意义. 对于 $5.45 < r_s < 6.03$，将发生什么情况?

1.7 就势 $V(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|) = g\delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})$ 重作习题1.6.试证明当 $20/9 < gN/V\bar{T} < (5/3)2^{\frac{2}{3}} = 2.64$ 时，系统是部分磁化的. 这里 $\bar{T}$ 是在无磁化态中每个粒子的平均动能，而 N/V 是相应的粒子密度. 在这范围以外将发生什么情况?

第二章 统 计 力 学

在建立多粒子系集的量子力学描述以前，回顾一些热力学关系式是有帮助的．初等的讨论通常是考虑粒子数固定的系集，但是对这里的目的来说，这样的描述太局限了．因此必须把这种处理推广，使之可以包括变粒子数N的可能性．这个方法用巨正则系综来表示最为简单，一般说来，这比正则系综（N固定）容易处理．此外，存在这样一些物理系统，粒子数可变是其基本物理特性，而不是数学上的方便；例如，在超流氦和超导电体中，宏观的凝聚态相当于粒子的贮存池，它可与系统的其余部分交换粒子．当然，这些系统最好用N不守恒的模型哈密顿函数描写，因而必须采用较一般的描述．

4. 热力学和统计力学的回顾

虽然我们也能处理包含几种不同类型粒子的系统，但是对大多数物理应用来说，并不需要添加这种一般性，因而我们只考虑单一成份的系统．基本的热力学恒等式

$$dE = TdS - PdV + \mu dN \tag{4.1}$$

规定了熵S、体积V、和粒子数N的独立微小变化所引起的内能E的改变．方程(4.1)表明内能是这三个变量的热力学函数，$E = E(S, V, N)$，而温度T、压强P和化学势μ则与E的偏导数相联系：

$$T = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{VN}, \quad -P = \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{SN}, \quad \mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{SV}. \tag{4.2}$$

在量子力学系统处于基态的特例中，熵为零，而化学势成为

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_V \quad (S = 0), \tag{4.3}$$

这里 E 是基态能量. 更一般地说，方程 (4.1) 和 (4.2) 可解释为化学势的定义.

内能对研究等熵过程是有用的；但是实际上，实验通常是在固定温度下进行的，因此作 Legendre 变换使变量变到 (T, V, N) 或 (T, P, N) 就比较方便. 由此得到的函数称为 Helmholtz 自由能 $F(T, V, N)$ 和 Gibbs 自由能 $G(T, P, N)$，其定义为

$$F = E - TS, \qquad G = E - TS + PV. \tag{4.4}$$

取这二个方程的微分，并利用方程 (4.1)，就得出

$$\begin{aligned} dF &= -SdT - PdV + \mu dN, \\ dG &= -SdT + VdP + \mu dN, \end{aligned} \tag{4.5}$$

这就显示出 F 和 G 确实是上面所指定的变量的热力学函数. 特别是，化学势可以定义为

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{TV} = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{TP}. \tag{4.6}$$

此外，研究 (T, V, μ) 这样一组独立变量常常是重要的，这一组变量对可变的 N 是恰当的. 再一次的 Legendre 变换导至热力学势

$$\Omega(T, V, \mu) = F - \mu N = E - TS - \mu N, \tag{4.7}$$

相应的微分

$$d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu. \tag{4.8}$$

其中的系数直接由下列诸式给出

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V\mu},$$

$$P=-\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{T\mu},$$
$$N=-\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{TV}, \tag{4.9}$$

这些方程在后面的应用中特别有用.

E、F、G和Ω虽然是描述同一系统的形式上等价的方法,但是它们的独立变量在一个重要方面是不同的. 具体说,集 (S, V, N) 完全由广延变量所组成,即这些量正比于其中物质的实际的量. 变换到 F, 以及随后变换到G或Ω可以说是减少广延变量的数目而增加强度变量的数目,强度变量是与物质的实际量无关的. 广延变量和强度变量之间的这一区别导致一个重要结果. 考虑一个比例变换,所有的广延变量(包括 E、F、G和Ω)都乘上因子 λ. 为确定起见,研究内能,它变为

$$\lambda E = E(\lambda S, \lambda V, \lambda N).$$

对 λ 取导数,然后置 $\lambda = 1$:

$$\begin{aligned} E &= S\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{VN} + V\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{SN} + N\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{SV} \\ &= TS - PV + \mu N, \end{aligned} \tag{4.10}$$

其中用到方程(4.2). 这里通过物理论证而得到的方程(4.10)是关于齐次函数的 Euler 定理的一个特例. 其余的热力学函数立即求出为

$$F = -PV + \mu N, \quad G = \mu N, \quad \Omega = -PV, \tag{4.11}$$

这说明单一组份的系统的化学势就是每个粒子的 Gibbs 自由能 $\mu = N^{-1}G(T, P, N)$, 还有 $P = -V^{-1}\Omega(T, V, \mu)$. 后一结果也是方程 (4.9) 的明显后果,因为Ω和V是广延量,而T和μ是强度量.

到这里为止,我们只用到宏观热力学,它只讲述系统的宏观性质之间的联系. 理论的微观内容必须通过统计力学另外

加进去，统计力学讲述热力学函数与多粒子系集的哈密顿函数之间的联系．对于化学势为 μ 而温度为

$$T \equiv \frac{1}{k_B\beta} \tag{4.12}$$

(这里 k_B 是 Boltzmann 常数，$k_B = 1.381 \times 10^{-16}$ 尔格/度)的巨正则系综，巨配分函数定义为

$$\begin{aligned} Z_G &\equiv \sum_N \sum_j e^{-\beta(E_j-\mu N)} \\ &= \sum_N \sum_j \langle Nj|e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}|Nj\rangle \\ &= \mathrm{Tr}(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}), \end{aligned} \tag{4.13}$$

这里 j 表示具有固定的粒子数 N 的所有态的集合，求迹号所要求的求和既对 j 又对 N 进行．统计力学的一个基本结论断言

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \ln Z_G, \tag{4.14}$$

它使我们能够从巨配分函数算出所有宏观的平衡热力学性质．

对应于方程 (4.13) 的统计算符 $\hat{\rho}_G$ 由下式给出

$$\hat{\rho}_G = Z_G^{-1} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}. \tag{4.15}$$

借助于方程 (4.14)，$\hat{\rho}_G$ 可以紧凑地改写成

$$\hat{\rho}_G = e^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}. \tag{4.16}$$

对于任一个算符 $\hat{O}$，系综平均值 $\langle\hat{O}\rangle$ 按下列规定得出

$$\begin{aligned} \langle\hat{O}\rangle &= \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_G\hat{O}) \\ &= \mathrm{Tr}(e^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}\hat{O}) \\ &= \frac{\mathrm{Tr}(e^{-\beta(\hat{H}+\mu\hat{N})}\hat{O})}{\mathrm{Tr}e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}. \end{aligned} \tag{4.17}$$

这些表达式的效用将在第 5 节用实例加以说明，那里将回顾理想的 Bose 和 Fermi 气体的热力学行为．

5. 理 想 气 体[1)]

现在我们回顾无相互作用的 Bose 和 Fermi 气体的性质：来应用上述结果．在讨论中将始终采用简化的记号

$$\beta = (k_B T)^{-1}. \tag{5.1}$$

如果采用抽象的 Hilbert 空间中的态的完全集合把方程(4.13)详细地写出，就有

$$\begin{aligned} Z_G &= \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\right) \\ &= \sum_{n_1\cdots n_\infty} \langle n_1\cdots n_\infty | e^{\beta(\mu\hat{N}-\hat{H}_0)} | n_1\cdots n_\infty\rangle \\ &= e^{-\beta\Omega_0(T,V,\mu)}. \end{aligned} \tag{5.2}$$

由于这些态是哈密顿函数 $\hat{H}_0$ 和粒子数算符 $\hat{N}$ 的本征态，所以这两个算符都可用它们的本征值代替，

$$\begin{aligned} Z_G = \sum_{n_1\cdots n_\infty} \Big\langle n_1\cdots n_\infty \Big| \exp\Big[\beta\Big(\mu\sum_i n_i \\ - \sum_i \varepsilon_i n_i\Big)\Big] \Big| n_1\cdots n_\infty\Big\rangle. \end{aligned} \tag{5.3}$$

指数函数现在是 c 数，并且等价于一些指数函数的积；因此对期待值的求和分解为分别属于各个模式的迹的乘积，

$$\begin{aligned} Z_G = \sum_{n_1} \langle n_1 | e^{\beta(\mu n_1-\varepsilon_1 n_1)} | n_1\rangle \cdots \\ \times \sum_{n_\infty} \langle n_\infty | e^{\beta(\mu n_\infty-\varepsilon_\infty n_\infty)} | n_\infty\rangle, \end{aligned} \tag{5.4}$$

这可以紧凑地写成

$$Z_G = \prod_{i=1}^{\infty} \mathrm{Tr}_i e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)\hat{n}_i}. \tag{5.5}$$

---

1) 本节的论述在统计力学的任何一本好书中都有，例如 L. D. Landau and E. M. Lifshitz "Statistical Physics," chap. V, Pergamon Press, London, 1958. (中译本，p. 189, 1964 年版)

对于玻色子，占据数是没有限制的，因此在方程(5.5)中对 n_i 求和必须遍及一切整数

$$Z_G = \prod_{i=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (e^{\beta(\mu-\epsilon_i)})^n = \prod_{i=1}^{\infty} (1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_i)})^{-1}. \quad (5.6)$$

方程(5.6)的对数给出热力学势

$$\Omega_0(T, V, \mu) = -k_B T \ln \prod_{i=1}^{\infty} (1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_i)})^{-1}, \quad (5.7)$$

$$\Omega_0(T, V, \mu) = k_B T \sum_{i=1}^{\infty} \ln(1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}) \text{ (Bose 统计)}. \quad (5.8)$$

像在方程(4.9)中那样，保持 T 和 V（等价于说 ϵ_i）固定，拿 Ω_0 对化学势微分，就得到平均粒子数

$$\langle N \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} n_i^0 = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)} - 1} \quad \text{(Bose 统计)}, \quad (5.9)$$

这里 n_i^0 是第 i 个态的平均占据数.

对于费米子，占据数或是 0 或是 1，方程(5.5)中的求和就限于对这两个值进行，

$$Z_G = \prod_{i=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{1} (e^{\beta(\mu-\epsilon_i)})^n = \prod_{i=1}^{\infty} (1 + e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}). \quad (5.10)$$

两边取对数，就有

$$\Omega_0(T, V, \mu) = -k_B T \sum_{i=1}^{\infty} \ln(1 + e^{\beta(\mu-\epsilon_i)})$$

$$\text{(Fermi 统计)}, \quad (5.11)$$

而粒子数成为

$$\langle N \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} n_i^0 = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)} + 1} \text{ (Fermi 统计)}. \quad (5.12)$$

虽然玻色子和费米子只是在方程(5.9)和方程(5.12)的分母中差一个符号，但这个符号却导致这些系集的行为上令人注目的区别.

玻色子

我们首先考虑无相互作用玻色子的集体，其能谱是

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{5.13}$$

我们假设系集包含在一个大体积 V 中，并对单粒子波函数加上周期性边界条件．就像方程(3.26)中那样，对单粒子能级的求和可按照下式代之以对波数矢量的积分，

$$\sum_i \to g\int d^3n = gV(2\pi)^{-3}\int d^3k, \tag{5.14}$$

这里 g 是各个单粒子动量态的简并度．例如，对无自旋的粒子 $g=1$．方程(5.14)中的态密度可用方程(5.13)改写为

$$\begin{aligned}\frac{gV}{(2\pi)^3}4\pi k^2 dk &= \frac{gV}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{\varepsilon d\varepsilon}{2\varepsilon^{\frac{1}{2}}}\\ &= \frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon,\end{aligned} \tag{5.15}$$

而理想 Bose 气体的热力学势的方程(5.8)成为

$$\begin{aligned}-\frac{\Omega_0}{k_BT} &= \frac{PV}{k_BT}\\ &= -\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{\frac{1}{2}}\ln(1-e^{\beta(\mu-\varepsilon)}).\end{aligned} \tag{5.16}$$

简单的分部积分就给出

$$PV = \frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2}{3}\int_0^\infty d\varepsilon\frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}. \tag{5.17}$$

换个方式，方程(4.9)、(4.10)和(5.8)的结合使我们可写出

$$E = \sum_i n_i^0\varepsilon_i = \frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\varepsilon\frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}, \tag{5.18}$$

这表明理想 Bose 气体的物态方程由下式给出

$$PV = \frac{2}{3} E. \tag{5.19}$$

按类似方式，粒子数成为

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}. \tag{5.20}$$

虽然方程(5.17)和(5.20)决定理想 Bose 气体的各热力学变量作为 T、V 和 μ 的函数，但是在原则上方程(5.20)可以反转过来决定化学势作为粒子数的函数．把它代入方程(5.17)就给出热力学变量作为 T、V 和 N 的函数．

只有当 $\varepsilon - \mu \geqslant 0$，方程(5.20)才有意义．否则，对某些 ε 值，平均占据数 n_0 将小于零．特定地说，ε 可以为零，所以理想 Bose 气体的化学势必需满足条件：

$$\mu \leqslant 0. \tag{5.21}$$

为了理解这个关系式，让我们回忆当 N 固定时的化学势的经典极限[1]：

$$\frac{\mu}{k_B T} \to -\infty \quad (T \to \infty). \tag{5.22}$$

在这个极限下，可以看到 Bose 和 Fermi 气体给出同一个表示式

$$N \to \sum_i e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \quad (T \to \infty), \tag{5.23}$$

这就是我们熟知的 Boltzmann 分布，而

$$\Omega_0 = -PV = -k_B T \sum_i e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}$$

$$= -N k_B T \qquad (T \to \infty), \tag{5.24}$$

这是经典理想气体的物态方程．求和可以近似地作为积分算出，

1) L. D. Landau and E. M. Lifshitz, 前引书, sec. 45.

$$\sum_i e^{-\beta\epsilon_i} = gV(2\pi)^{-3}\int d^3k\, e^{-\hbar^2k^2/2mk_BT}$$

$$= gV\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}, \tag{5.25}$$

而方程 (5.23) 给出用 T、V、N 表示化学势的经典表式 μ_C

$$\frac{\mu_C}{k_BT} = \ln\left[\frac{N}{gV}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{\frac{3}{2}}\right]. \tag{5.26}$$

注意，当 $T\to\infty$ 时，方程 (5.22) 的确满足. 此外，Fermi, Bose 和 Boltzmann 统计现在明显是重合的，因为粒子分布在很多态上. 这样，任何一个态上的平均占据数远小于一，因而量子条件不起作用.

方程 (5.26) 表示的经典化学势示意地描绘在图 5.1 中. 在固定密度下，随着温度的下降，μ_C/k_BT 通过零而变为正的，并在 $T=0$ 向 $+\infty$ 发散. 因为这一行为违反方程 (5.21)，所以理想 Bose 气体的化学势必然低于经典值，保持为负或零. 设 T_0 是理想 Bose 气体化学势变为零的温度. 这个临界温度容易用方程 (5.20) 定出

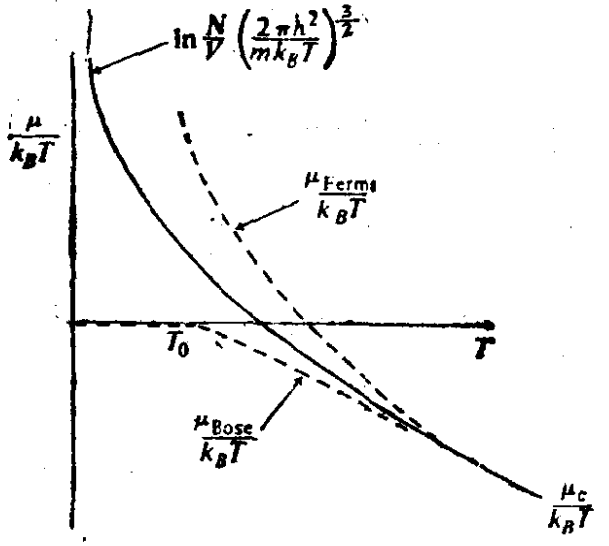


图 5.1 对于固定的 N 和 V，理想经典的、Fermi 和 Bose 气体的化学势.

$$\frac{N}{V}=\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\varepsilon\,\frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\varepsilon/k_BT_0}-1},\tag{5.27}$$

这可以用新的变数 $x=\varepsilon/k_BT_0$ 改写为

$$\frac{N}{V}=\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty dx\,\frac{x^{\frac{1}{2}}}{e^x-1}.\tag{5.28}$$

这个积分，在附录 A 里算出

$$\frac{N}{V}=\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right),\tag{5.29}$$

方程 (5.29) 可反转过来给出

$$T_0=\frac{\hbar^2}{2mk_B}\left(\frac{4\pi^2}{g\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

$$=\frac{3.31}{g^{\frac{2}{3}}}\frac{\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}},\tag{5.30}$$

在这个温度，理想 Bose 气体的化学势达到零．这个数值具有简单的物理解释，即在这样的温度下，热能 k_BT_0 与理想气体唯一的另一个强度量可以相比，这另一个强度量指的是把一个粒子定域于体积 V/N 中的相应的零点能 $(\hbar^2/m)(N/V)^{\frac{2}{3}}$．

将温度降到 T_0 以下，会出现什么情况？这在物理上是很清楚的，许多玻色子将开始占据最低的可占用的单粒子态即基态．但是，对于 $\mu=0$ 和 $T<T_0$，方程 (5.20) 中的积分小于 N/V，这是因为上述条件使分母的数值比起它在 T_0 时的值增大了．这样，方程 (5.20) 不再能给出正确的密度 N/V，因而理论显得行不通了．这个困难可以追溯到在方程 (5.14) 中用积分代替了求和，因此，考察原来的和

$$N=\sum_i\left(e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1\right)^{-1}.$$

当 $\mu\to 0$，除第一项以外，所有的项趋向于有限的极限；这些

有限项的和正是上面算出的积分[1]. 与此相反，第一项在转换为积分时丢失了，因为态密度中的 $\varepsilon^{\frac{1}{2}}$ 在 $\varepsilon = 0$ 变为零. 然而，我们可以看到，当 $\mu \to 0$ 时，这个第一项变得任意地大，因而足以补偿其它粒子. 这行为反映了 $\varepsilon = 0$ 的单一量子态上的粒子占据数是巨大的.

因此，我们的结论是，当温度 $T < T_0$ 时，化学势 μ 必须是无限小并且是负的

$$\mu = 0^-, \qquad (\text{对 } T \leqslant T_0). \tag{5.31}$$

在这个温度范围内，能量 $\varepsilon > 0$ 的粒子密度成为

$$\frac{dN_\varepsilon}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1}, \tag{5.32}$$

其积分值

$$\frac{N_{\varepsilon>0}}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dx \frac{x^{\frac{1}{2}}}{e^x - 1}$$

$$= \frac{N}{V}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}. \tag{5.33}$$

其余粒子则在 $\varepsilon = 0$ 的最低能量的态上

$$\frac{N_{\varepsilon=0}}{V} = \frac{N}{V}\left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}\right]. \tag{5.34}$$

在简并区域 $(T < T_0)$，化学势由方程(5.31)给出，Bose 气体的能量完全来自不在凝聚态中的那些粒子

$$\frac{E}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} k_BT \int_0^\infty dx \frac{x^{\frac{3}{2}}}{e^x - 1}.$$

附录 A 也处理了这个积分，我们求得

$$\frac{E}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_BT}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} k_BT\zeta\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right), \tag{5.35}$$

---

1) 严格说来，处于低激发态的占据数是 $N^{2/3}$ 数量级，它只有在热力学极限下才可以忽略. 有关 Bose-Einstein 凝聚的严格讨论可看 R. H. Fowler and H. Jones. *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **34**: 573(1938)

这可用方程 (5.29) 中的 T_0 改写成

$$E = \frac{\zeta\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} N k_B T \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$= 0.770\, N k_B T \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (T \leqslant T_0). \tag{5.36}$$

于是定容热容量为

$$C_V = \frac{5}{2}\left[0.770\, N k_B \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \qquad (T \leqslant T_0), \tag{5.37}$$

它按 $T^{\frac{3}{2}}$ 变化并在 $T = 0$ 为零. 方程 (5.35) 也可用来改写物态方程:

$$P = \frac{2}{3}\frac{E}{V} = \frac{2}{3}\frac{2\sqrt{2}}{4\pi^2}\zeta\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\frac{m^{\frac{3}{2}}(k_B T)^{\frac{5}{2}} g}{\hbar^3}$$

$$= 0.0851\, m^{\frac{3}{2}}(k_B T)^{\frac{5}{2}}\hbar^{-3} g \qquad (T \leqslant T_0). \tag{5.38}$$

在零温度，压强消失，因为所有粒子都处于零动量的态，所以对容器的壁没有力作用. 此外，压强与密度 N/V 无关，只取决于温度 $T \leqslant T_0$.

我们已经看到理想 Bose 气体具有临界温度 T_0，化学势在 T_0 改变其解析形式. 因为 $\mu(T, V, N)$ 由方程 (4.6) 与自由能相联系，因而自然期望其它热力学函数也有类似的不连续性，现在我们来证明，定容热容量 C_V 的斜率在 T_0 不连续. $T < T_0$ 的行为已由方程 (5.37) 给出；而 $T > T_0$ 的相应的量可如下求出：定义一个按照 $T > T_0$ 而 $\mu = 0$ 计算出来的(虚构的)粒子数

$$N_0(T) \equiv \frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\epsilon/k_B T} - 1}.$$

这个表示式清楚地意味着

$$\frac{N_0(T)}{N_0(T_0)}=\frac{N_0(T)}{N}=\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}\quad(T>T_0).$$

方程(5.20)决定 $T>T_0$ 时的实际的 $\mu(T,V,N)$，它现在可以改写为

$$N-N_0(T)=\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{\frac{1}{2}}\times\left\{\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}-1}-\frac{1}{e^{\varepsilon/k_BT}-1}\right\}.$$

因为对于 $0<T-T_0\ll T_0$，μ/k_BT 是小的负值，所以这个积分的主要贡献来自小的 ε 值．这样，我们把被积函数展开而给出

$$N-N_0(T)\approx\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\mu k_BT\int_0^\infty d\varepsilon\,\frac{1}{\varepsilon^{\frac{1}{2}}(\varepsilon+|\mu|)}$$
$$\approx-\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\pi k_BT_0|\mu|^{\frac{1}{2}},$$

这里在 $T-T_0$ 的开头一级中置 $T=T_0$．与方程 (5.29) 结合导至

$$\mu\approx-\left[\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\pi}\right]^2k_BT_0\left[\frac{N_0(T)}{N}-1\right]^2$$
$$=-\left[\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\pi}\right]^2k_BT_0\left[\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}-1\right]^2\quad(T\gtrsim T_0).$$

注意当 $T\to T_0$，μ 按二次方趋于零，以致 $\mu(T,V,N)$ 的二阶导数在 T_0 不连续(见图 5.1)．

把物态方程 (5.19) 微分，就可以完成余下的计算

$$\left(\frac{\partial E}{\partial\mu}\right)_{TV}=\frac{3}{2}\left[\frac{\partial(PV)}{\partial\mu}\right]_{TV}=\frac{3}{2}N,$$

这里后一个等号是由方程 (4.9) 和 (4.11) 来的．这个结果使

我们可以求得：在 T 和 V 不变时，由 μ 的很小的改变所引起的能量改变．如用 $E(T, V)$ 表示化学势为零时的能量[方程(5.35)]，那么实际能量近似地由下式给出

$$E = \begin{cases} E(T, V) & (T < T_0), \\ E(T, V) + \dfrac{3}{2} N\mu & (T > T_0). \end{cases}$$

现在用上面得出的 $\mu(T, V, N)$ 的表示式把变量改为 T, V 和 N．C_V 斜率的跃变就由下式给出[1]

$$\begin{aligned} \Delta\left[\frac{\partial C_V}{\partial T}\right]_{T_0} &= -\frac{3}{2} N k_B T_0 \left[\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\pi}\right]^2 \\ &\quad \times \left\{\frac{\partial^2}{\partial T^2}\left[\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} - 1\right]^2\right\}_{T_0} \\ &= -\frac{27}{4}\left[\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\pi}\right]^2 \frac{N k_B}{T_0} \\ &= -3.66 \frac{N k_B}{T_0}. \end{aligned} \tag{5.39}$$

完整的曲线示意地描画在图 5.2 中．这种不连续性意味着理想 Bose 气体在温度 T_0 展现相变．这个温度具有这样的物理解释，即在这一点，全部粒子中的一个有限部分开始占据零动量的态．在 T_0 以下，最低的单粒子态的占据数 n_0^0 的数量级为 N 而不是 1．如 F. London 所强调指出[2]：系集是在动量空间而不是在坐标空间有序化，这个现象叫做 Bose-Einstein 凝聚。

---

1) F. London "Superfluids", Vol. II, sec. 7, Dover, New York 1964; 这里是按照 L. D. Landau and E. M. Lifshitz 的方法，前引书 170 页(中译本 213 页)．

2) F. London "Superfluids' Vol. II, pp. 39, 143.

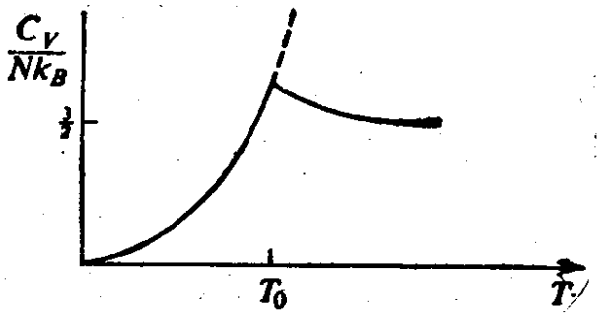


图 5.2 理想 Bose 气体的定容热容量.

为了估计所涉及的量的大小，我们回忆液体 He^4 在低温下的密度

$$\rho_4 = 0.145 \text{ 克} \cdot \text{厘米}^{-3}.$$

将这个量代入方程 (5.30)，我们求得数值

$$T_0 = 3.14 \text{ K}. \tag{5.40}$$

这就是用液氦的参数算出的理想 Bose 气体的转变温度. 上述讨论指出，低于这个温度，系集由两个不同成份所组成，其一对应于占据零动量态因而不具有能量的粒子，另一对应于处在激发态的粒子. 的确，实验事实是，液体 He^4 在 2.2K (λ 点)发生 HeI 和 HeII 两相之间的相变. 低于这温度，He^4 的行为一如超流体和正常流体的混合物，而且超流体既没有热容量也没有粘滞性. 随着温度趋于零，正常的那部分趋于消失，这也是真的. 因此，理想 Bose 气体的 Bose-Einstein 凝聚提供了实际的 He^4 的定性描述. 但是在细节上，理想 Bose 气体是一个过于简单的模型. 例如，液体 He^4 的实际的比热在低温下按 T^3 变化，而在 λ 点成为对数型无限大. 此外，指认 HeII 的超流体部分就是处于零动量态的粒子，这是不正确的. 诚然，理想 Bose 气体的激发谱排除了在任何有限速度下的超流性. 这些问题将在第六、十和十四章详细地讨论，那里将表明对于理解像液体 He^4 之类量子流体的性质，粒子间的相互作用起着关键的作用.

费米子

现在我们讨论属于费米子系集的方程 (5.11) 和 (5.12)，这种系集可作为许多物理系统的模型. 基本方程是，平均占据数为

$$n_i^0 = (e^{\beta(\epsilon_i-\mu)} + 1)^{-1}. \tag{5.41}$$

用非相对论能谱 [方程 (5.13)]，按照对玻色子的同样分析得到

$$PV = \frac{2}{3}E = \frac{2}{3}\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\epsilon\,\frac{\epsilon^{\frac{3}{2}}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}, \tag{5.42}$$

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\epsilon\,\frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}, \tag{5.43}$$

其中 g 是简并度(对自旋为 1 / 2 的 Fermi 气体，$g = 2$). 如前所说，在玻色子和费米子之间的唯一差别是方程 (5.42) 和 (5.43) 的分母中的减号或加号.

考虑分布函数 n^0. 方程 (5.41) 表明，对 μ 和 T 的一切值，条件

$$n^0 \leqslant 1$$

总是有保证的. 这里有意义的是，可把方程 (5.43) 反转过来以确定 N 固定时的化学势；在图 5.1 中已示意地画出这个函数. 在高温或经典极限下，再次得到

$$n^0 = e^{\beta(\mu-\epsilon)} \qquad (T \to \infty),$$

这正是熟知的 Boltzmann 分布. 但是，不同于玻色子的情况，随着温度下降，没有东西阻止化学势变为正值；特别是，我们有

$$n^0 = \frac{1}{2} \qquad (\text{当 } \epsilon = \mu).$$

在零温度极限下，Fermi 分布退化为阶跃函数

$$\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1} \xrightarrow[T\to 0]{} \left\{\begin{matrix} 0 & (\varepsilon > \mu) \\ 1 & (\varepsilon < \mu) \end{matrix}\right\} = \theta(\mu - \varepsilon). \quad (5.44)$$

这个行为是容易理解的，因为把直到

$$\mu = \varepsilon_F \quad (\text{在 } T = 0)$$

为止的能级一一填满，就得到系统的能量最低的态．因此理想 Fermi 气体在零温度的化学势是一个有限的正数，就等于 Fermi 能．三种有代表性的情况下的平衡分布数，示意地画在图 5.3 中．

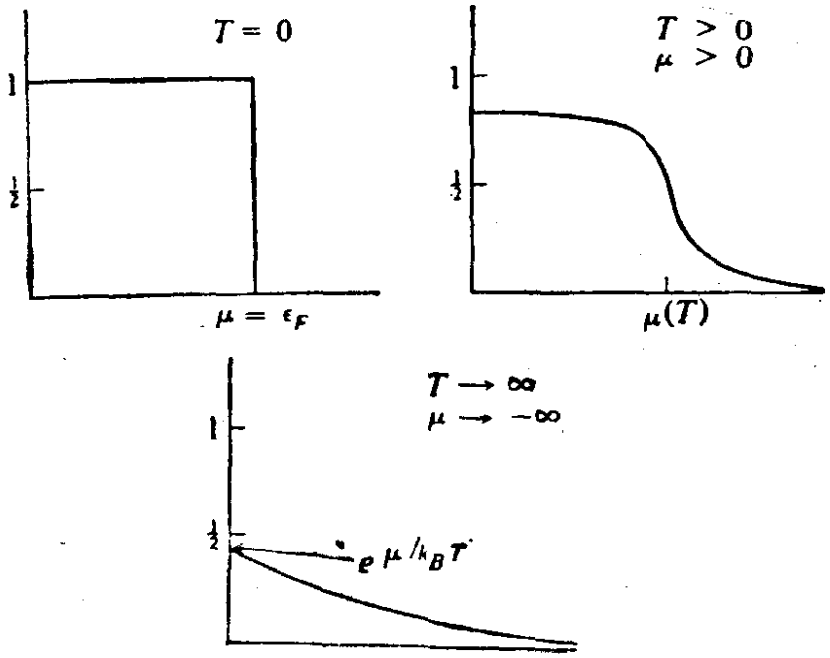


图 5.3　在各种温度下，理想 Fermi 气体分布函数 $n(\varepsilon)$ 的示意图．

我们首先计算理想 Fermi 气体在 $T = 0$ 的性质．因为这时分布函数是阶跃函数，所以从方程（5.43）和（5.44）得到密度为

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^{\mu} d\varepsilon\, \varepsilon^{\frac{1}{2}}.$$

这个积分容易算出为

$$\frac{N}{V}=\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2}{3}\mu^{\frac{3}{2}}, \tag{5.45}$$

它可以反转过来以求得 Fermi 能

$$\epsilon_F\equiv\mu(T=0)=\left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\equiv\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}, \tag{5.46}$$

及 Fermi 波数

$$k_F=\left(\frac{6\pi^2N}{gV}\right)^{\frac{1}{3}}. \tag{5.47}$$

类似地，能量从下式得出

$$\frac{E}{V}=\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^{\mu}d\epsilon\,\epsilon^{\frac{3}{2}}=\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2}{5}\mu^{\frac{5}{2}},$$

与方程 (5.45) 相结合给出

$$\frac{E}{N}=\frac{3}{5}\mu=\frac{3}{5}\epsilon_F. \tag{5.48}$$

最后，物态方程 (5.42) 成为

$$PV=\frac{2}{3}E=\frac{2}{5}N\epsilon_F, \tag{5.49 a}$$

$$P=\frac{2}{5}\left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{5}{3}}, \tag{5.49b}$$

这表明 Fermi 气体在零温度下具有有限的压强．这是因为 Pauli 原理要求填满直到 Fermi 动量为止的动量态，而这些较高的动量态对任何容器的壁施加压强．

现在轮到讨论虽小但有限的* 温度，这里的困难在于要把方程 (5.43) 反转过来用总粒子数表出化学势．定义变量 $x\equiv(\epsilon-\mu)/k_BT$．则方程 (5.42) 可改写成

$$PV=\frac{2}{3}\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}(k_BT)^{\frac{5}{2}}\int_{-\mu/k_BT}^{\infty}$$

---

* 有限一词，英文为 finite，包括两方面的含意，即既非无限大，也不是无限小．——责任编辑注

$$\times dx\,\frac{(x+\mu/k_BT)^{\frac{3}{2}}}{e^x+1}. \tag{5.50}$$

引入 $\alpha\equiv\mu/k_BT$，也将是方便的；因为当 $T\to 0$，μ 是有限的，所以我们关心的是 $\alpha\to\infty$ 的极限．考虑积分

$$\begin{aligned} I(\alpha)&\equiv\int_{-\alpha}^{\infty}dx\,\frac{(x+\alpha)^{\frac{3}{2}}}{e^x+1}\\ &=\int_{-\alpha}^{0}dx\,\frac{(\alpha+x)^{\frac{3}{2}}}{e^x+1}+\int_{0}^{\infty}dx\,\frac{(\alpha+x)^{\frac{3}{2}}}{e^x+1}. \end{aligned}\tag{5.51}$$

在第一个积分中作变数变换 $x\to -x$，并利用恒等式 $(e^{-x}+1)^{-1}\equiv 1-(e^x+1)^{-1}$，就得

$$\begin{aligned} I(\alpha)=&\int_0^{\alpha}dx(\alpha-x)^{\frac{3}{2}}+\int_0^{\infty}dx\frac{(\alpha+x)^{\frac{3}{2}}-(\alpha-x)^{\frac{3}{2}}}{e^x+1}\\ &+\int_{\alpha}^{\infty}dx\,\frac{(\alpha-x)^{\frac{3}{2}}}{e^x+1}. \end{aligned}$$

最后一项在 α 很大的极限下按指数式变小，而第二个积分的分子可近似为

$$(\alpha+x)^{\frac{3}{2}}-(\alpha-x)^{\frac{3}{2}}=3x\alpha^{\frac{1}{2}}+O(\alpha^{-\frac{3}{2}})\quad(\alpha\to\infty).$$

因此，直截了当的计算（见附录 A）给出渐近展开式

$$\begin{aligned} I(\alpha)&=\frac{2}{5}\alpha^{\frac{5}{2}}+\frac{\pi^2}{4}\alpha^{\frac{1}{2}}+\cdots\\ &=\left(\frac{1}{k_BT}\right)^{\frac{5}{2}}\left[\frac{2}{5}\mu^{\frac{5}{2}}+(k_BT)^2\frac{\pi^2}{4}\mu^{\frac{1}{2}}+\cdots\right]. \end{aligned}\tag{5.52}$$

这样，写到 T^2 或 $1/\alpha^2$ 数量级，方程 (5.50) 是

$$PV\underset{T\to 0}{=}\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2}{3}\left[\frac{2}{5}\mu^{\frac{5}{2}}+(k_BT)^2\frac{\pi^2}{4}\mu^{\frac{1}{2}}+\cdots\right]. \tag{5.53}$$

注意这个结果给出 $PV(T,V,\mu)$，而 T,V,μ 是热力学势的适当的热力学变量．这方程里的改正项（用$\cdots$表示的）是 T^2 的高级项，所以在这里所研究的数量级内可以忽略．

从下面这个表示式可立即定出粒子数：

$$N=\left[\frac{\partial(PV)}{\partial\mu}\right]_{TV}$$

$$=\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2}{3}\left[\mu^{\frac{3}{2}}+(k_BT)^2\frac{\pi^2}{8\mu^{\frac{1}{2}}}+\cdots\right]. \quad (5.54)$$

如果 N/V 用方程 (5.46) 中的 Fermi 能 ε_F 来表示，就有

$$\mu=\varepsilon_F\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2+\cdots\right]^{-\frac{2}{3}}, \quad (5.55)$$

从这方程可以解出 μ 作为 T^2 的幂级数

$$\mu=\varepsilon_F\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2+\cdots\right]. \quad (5.56)$$

使 V 和 μ 不变，把方程 (5.53) 微分，可定出熵

$$S(T,V,\mu)=\left[\frac{\partial(PV)}{\partial T}\right]_{V\mu}$$

$$=\frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2}{3}\left[\frac{2\pi^2}{4}k_B^2T\mu^{\frac{1}{2}}+\cdots\right]. \quad (5.57)$$

既然 S 是一个热力学函数，它可以用任何变数来表示；特定地说，用方程 (5.56) 代入，在 T 的最低级下得到

$$S(T,V,N)=Nk_B\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\frac{\pi^2}{2}. \quad (5.58)$$

这样就可从下式计算热容量

$$C_V=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{VN}=\frac{\pi^2}{2}Nk_B\frac{k_BT}{\varepsilon_F}, \quad (5.59)$$

这给出

$$C_V=S=\frac{mk_B^2}{\hbar^2}\left(\frac{g\pi}{6}\right)^{\frac{2}{3}}NT\left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (T\to 0). \quad (5.60)$$

注意 Fermi 气体在低温下的热容量与温度成线性关系. 与此相反，高温下适用 Boltzmann 统计，理想 (Bose 或 Fermi) 气

体的热容量是

$$C_V \to \frac{3}{2} N k_B \quad (T \to \infty), \tag{5.61}$$

理想 Fermi 气体在一切温度下的热容量表示在图 5.4 中. 注意，不管在什么温度， Fermi 气体的热力学变量都没有间断点.

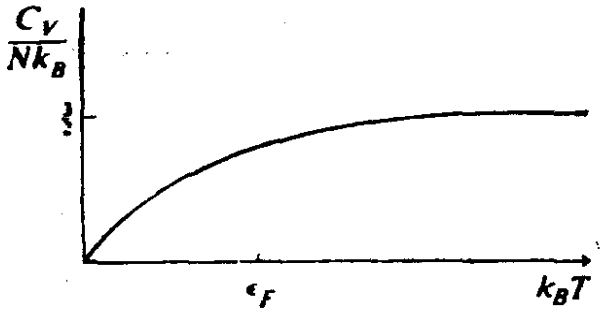


图 5.4 理想 Fermi 气体的定容热容量.

在金属理论、液体 He^3 理论、原子核结构研究、以及甚至在理解像白矮星结构和中子星结构之类形形色色的现象中，无相互作用的 Fermi 气体构成很有用的第一步近似. 但是，为了详尽了解这些多体系集，必须计入粒子间的相互作用，这构成本书的中心课题.

习　　题

2.1 试证明理想量子气体的熵由下式给出

$$S = -k_B \sum_i [n_i^0 \ln n_i^0 \mp (1 \pm n_i^0) \ln (1 \pm n_i^0)],$$

这里上(下)面的符号属于玻色子(费米子). 试对 Boltzmann 统计求出相应的表示式. 证明所有三种情况下的内能都是

$$E = \sum_i \epsilon_i n_i^0.$$

2.2 给定一个能谱 $\epsilon_p = [(pc)^2 + m_0^2 c^4]^{\frac{1}{2}} \to pc (p \to \infty)$，试证，超相对论理想气体满足物态方程 $PV = E/3$，这

里 E 是总能量.［与方程 (5.19) 和 (5.42) 比较］

2.3 试证明，二维理想 Bose 气体在任一有限温度下都不存在 Bose-Einstein 凝聚.

2.4 考虑一个立方箱 ($V = L^3$) 中的理想气体，其边界条件是单粒子波函数在器壁上为零.

(a) 求出态密度. 在热力学极限下，证明，玻色子和费米子两者的热力学函数都归结为第 5 节所得到的那些热力学函数.

(b) 试讨论 Bose 凝聚的起始点，并算出 $T < T_0$ 时的性质.

2.5 当金属加热到足够高的温度时，电子从金属表面发射出来，并可收集为热离子电流. 假设这些电子构成无相互作用的 Fermi 气体，试推导电流的 Richardson-Dushman 方程[1] 即 $i = (4\pi emk_B^2T^2/h^3)e^{-W/k_BT}$，这里 W 是金属的功函数(即移出一个电子所需要的能量).

2.6 试证明自旋为 1 / 2 的粒子的自由 Fermi 气体的顺磁自旋磁化率在 $T = 0$ 时为

$$\chi(T = 0) = \frac{3}{2}(2m/\hbar^2k_F^2)\mu_0^2N/V,$$

其中 μ_0 是一个粒子的磁矩. 试推导，相应的高温结果为 $\chi(T \to \infty) = \mu_0^2N/k_BTV$.

2.7 作为对原子核的第一级近似，把核看成是中子和质子的简并且无相互作用的 Fermi 气体.

(a) 每个能级的简并度是多少?

(b) 如果具有 A 个核子的核半径为 $R = r_0A^{\frac{1}{3}}$ 而 $r_0 \approx 1.2 \times 10^{-13}$ 厘米，问 k_F 和 ϵ_F 是多大? 它们怎样随 A 变化?

---

1) S. Pushman, *Rev. Mod. Phys.*, **2**: 381 (1930).

(c) 这个 Fermi 气体的压强是多大?

(d) 如果每个核子被认为在深度为 V_0 的恒定势场中运动,这 V_0 必需是多大?

(e) 在怎样的温度下这核的行为好像是由 Boltzmann 统计所描述的粒子的集体?

2.8 作为白矮星的模型,认为白矮星是由完全电离的He(α 粒子)和简并电子所组成的电中性气体.

(a) 试写出低密度(非相对论性的电子气体)和高密度(相对论性的电子气体)极限下定域流体静力学平衡的方程,把系统当作理想 Fermi 系统.

(b) 从而求出密度 $\rho(r)$ 的表示式以及总质量M和星体半径R之间的关系式 $M = M(R)$.

(c) 证明存在一个最大质量 M_{max},它与太阳质量 $M_\odot$ 可比拟. 试从物理上解释为什么这样?

(d) 用白矮星的典型参数 $\rho \approx 10^7$ 克/厘米$^3 \approx 10^7\rho_\odot$, $M \approx 10^{33}$ 克 $= M_\odot$, 中心温度 $\approx 10^7$ K $\approx T_\odot$ 检验开始的模型. 注意用数值积分得到的下列结果[1]:

1. $$\left.\begin{aligned} &\frac{1}{\xi^2}\frac{d}{d\xi}\left(\xi^2\frac{df}{d\xi}\right) = -f^{\frac{3}{2}} \\ &f'(0) = 0;\quad f(1) = 0 \end{aligned}\right\} \text{意味着} \begin{cases} f(0) = 178.2, \\ f'(1) = -132.4, \end{cases}$$

2. $$\left.\begin{aligned} &\frac{1}{\xi^2}\frac{d}{d\xi}\left(\xi^2\frac{df}{d\xi}\right) = -f^{3} \\ &f'(0) = 0;\ f(1) = 0 \end{aligned}\right\} \text{意味着} \begin{cases} f(0) = 6.897, \\ f'(1) = -2.018. \end{cases}$$

1) L. D. Landau and E. M. Lifshitz, 前引书 sec. 106.

第二部分　基态(零温度)理论

第三章　格林函数和场论(费米子)

在大多数有关情况中，微扰论开头少数几级，不能给出相互作用多粒子系统的恰当的描述，因此，发展一种求解 Schrödinger 方程直到微扰论的一切级的系统方法，就成为十分重要的了.

6. 三 种 图 象

作为一个预备步骤，我们将引入三个重要的图象 (Schrödinger 图象、相互作用图象和 Heisenberg 图象)，它们在分析二次量子化形式的 Schrödinger 方程[方程 (1.41) 和 (1.60)]时是很有用的.

Schrödinger 图象

通常的量子力学初等描述认为：态矢量是与时间有关的，而算符则是与时间无关的，算符是用熟知的规则从对应的经典量构成的. 因此 Schrödinger 方程的形式是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle = \hat{H}|\Psi_S(t)\rangle, \tag{6.1}$$

这里假定 $\hat{H}$ 不显含时间. 由于方程 (6.1) 是一阶微分方程，在 t_0 的初始态决定了其后的行为，容易得到形式解

$$|\Psi_s(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\Psi_S(t_0)\rangle. \tag{6.2}$$

这里算符的指数函数是用幂级数展开式来定义的．此外，$\hat{H}$ 是厄密的，所以指数式代表一个幺正算符．给定在时刻 t_0 的 Schrödinger 方程的解，方程 (6.2) 中的幺正变换产生出在时刻 t 的解．

相互作用图象

假定哈密顿函数不含时间且可表为下列两项的和，通常情况正是这样，

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \tag{6.3}$$

这里如只有 $\hat{H}_0$，就可得出一个可解的问题．现在我们怎样才能在计算中计入 $\hat{H}_1$ 的全部作用呢？用下列方式定义相互作用态矢量

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\Psi_S(t)\rangle, \tag{6.4}$$

这不过是在 t 时刻实行的一个幺正变换．通过实施对时间微分容易得到这个态矢量的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\left|\Psi_S(t)\right\rangle + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi_S(t)\right\rangle$$

$$= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}[-\hat{H}_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1]e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|\Psi_I(t)\rangle,$$

因而得到相互作用图象中的下列方程组

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = \hat{H}_1(t)|\Psi_I(t)\rangle, \\ \hat{H}_1(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \end{cases} \tag{6.5}$$

一般说，$\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}_1$ 不能对易，因此使这些算符的次序适当是很重要的．在 Schrödinger 图象中，一个任意的矩阵元可写为

$$\langle\Psi'_S(t)|\hat{O}_S|\Psi_S(t)\rangle = \langle\Psi'_I(t)|e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{O}_S e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|\Psi_I(t)\rangle, \tag{6.6}$$

这提示相互作用图象中的算符的定义

$$\hat{O}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{O}_S e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \tag{6.7}$$

方程 (6.4) 和 (6.7) 表明，在相互作用图象中，算符 $\hat{O}_I(t)$

和态矢量$|\Psi_I(t)\rangle$两者都与时间有关．这里的重要之点是算符对时间的依赖关系特别简单．将方程(6.7)对时间微分，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}(\hat{O}_S\hat{H}_0 - \hat{H}_0\hat{O}_S)e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

$$= [\hat{O}_I(t), \hat{H}_0]. \tag{6.8}$$

这里用到 Schrödinger 算符与时间无关的性质，以及下列事实：一个算符的函数跟这算符本身是可对易的．考虑一个表象，其中$\hat{H}_0$是对角的，

$$\hat{H}_0 = \sum_k \hbar\omega_k c_k^\dagger c_k. \tag{6.9}$$

相互作用图象中的产生和消灭算符对时间的依赖关系可从下列微分方程确定，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_{kI}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}[c_{kS}, \hat{H}_0]e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

$$= \hbar\omega_k c_{kI}(t),$$

这容易解出，

$$c_{kI}(t) = c_k e^{-i\omega_k t}, \tag{6.10a}$$

还有它的伴随算符

$$c_{kI}^\dagger(t) = c_k^\dagger e^{i\omega_k t}. \tag{6.10b}$$

这样，时间仅出现在复的周相因子中，这就意味着$c_I(t)$和$c_I^\dagger(t)$的算符性质正和 Schrödinger 图象中的相同．特定地说，c_k和$c_k^\dagger$的对易关系简单地就是第一章中的正则对易式．此外，Schrödinger 图象中的任一个算符可用完全集合c_k和$c_k^\dagger$表示，因而在相互作用图象中的对应算符就可用代换$c_k \to c_{kI}(t)$、$c_k^\dagger \to c_{kI}^\dagger(t)$得出．最后这个结果是由于恒等式

$$1 = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{i\hat{H}_0 t/\hbar},$$

它可插在 Schrödinger 图象中各个算符之间．

现在我们尝试求解相互作用图象中的运动方程．定义么

正算符 $\hat{U}(t, t_0)$，它用时刻 t_0 的态矢量决定时刻 t 的态矢量

$$|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle. \tag{6.11}$$

显然，$\hat{U}$ 必定满足关系式

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1. \tag{6.12}$$

对于有限的* 时间，$\hat{U}(t, t_0)$ 可用 Schrödinger 图象表示出来. 因为

$$\begin{aligned}|\Psi_I(t)\rangle &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\Psi_S(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\Psi_S(t_0)\rangle \\ &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}e^{-i\hat{H}_0 t_0/\hbar}|\Psi_I(t_0)\rangle,\end{aligned}$$

从而可以得出，

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}e^{-i\hat{H}_0 t_0/\hbar} \quad \text{(有限时间)}. \tag{6.13}$$

既然 $\hat{H}$ 和 $\hat{H}_0$ 不能对易，必须小心地保持算符的次序. 方程 (6.13) 立即给出 $\hat{U}$ 的几个一般性质

1. $\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) = 1$,

这就意味着 $\hat{U}$ 是幺正的:

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t, t_0). \tag{6.14}$$

2. $\hat{U}(t_1, t_2)\hat{U}(t_2, t_3) = \hat{U}(t_1, t_3)$, (6.15)

这表明 $\hat{U}$ 具有群的性质，还有

3. $\hat{U}(t, t_0)\hat{U}(t_0, t) = 1$,

这隐含着

$$\hat{U}(t_0, t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0). \tag{6.16}$$

虽然方程 (6.13) 是方程 (6.11) 所提出的问题的形式解，但就计算的目的来说，它不是很有用的. 代替它，我们将建立一个积分方程，而它可用迭代法解出. 很明显，从方程 (6.5) 和 (6.11) 来说，$\hat{U}$ 满足微分方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0) = \hat{H}_1(t)\hat{U}(t, t_0). \tag{6.17}$$

把这方程从 t_0 到 t 积分

---

* “有限”是指不为无限小，也不为无限大. ——责任编辑注

$$\hat{U}(t,t_0)-\hat{U}(t_0,t_0)=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\hat{U}(t',t_0).$$

这个结果加上边界条件 (6.12) 给出积分方程

$$\hat{U}(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\hat{U}(t',t_0). \tag{6.18}$$

假如 $\hat{U}$ 是一个 c 数函数，方程 (6.18) 将是一个 Volterra 积分方程，因为独立变量 t 作为积分上限而出现. 在很宽的条件下，Volterra 方程可用迭代法解出，并且这个解保证是收敛的，而不论积分核有多大[1]. 这里的算符方程不能保证具有同样的性质；尽管如此，我们仍将试用迭代法解方程 (6.18)，求解时始终保持算符的应有次序. 这样，解的形式是

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_1(t')+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \times\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')+\cdots. \tag{6.19}$$

考虑展开式中第三项，它可以改写成

$$\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'') =\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'') +\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt''\int_{t''}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t''), \tag{6.20}$$

因为右边的最后一项只不过是调换积分次序而得到的，如图 6.1 所示. 现在改变这个第二项中的傀变量，交换 t' 和 t'' 的指标，方程 (6.20) 中第二项就变为

---

1) 例如见 F. Smithies, "Integral Equations," p. 31, Cambridge University Press, Cambridge, 1962.

$$\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt''\int_{t''}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t'}^{t}dt''\hat{H}_1(t'')\hat{H}_1(t').$$

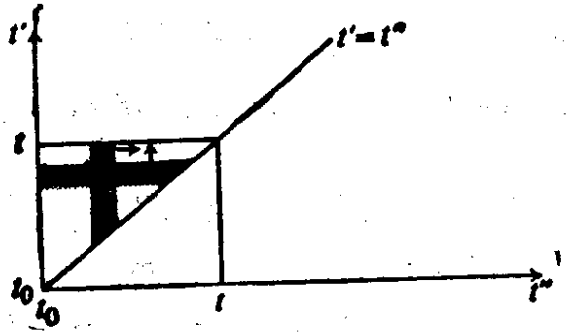


图 6.1 $\hat{U}(t,t_0)$ 中二级项的积分区域.

现在这两项可重新合并而给出

$$\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t}dt''\times[\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')\theta(t'-t'')+\hat{H}_1(t'')\hat{H}_1(t')\theta(t''-t')],\tag{6.21}$$

其中阶跃函数[方程 (3.28)]是很紧要的,因为不同时刻的算符 $\hat{H}_1$ 未必能对易. 方程 (6.21) 有这样的特点: 时间最迟的算符处在最左边. 我们把这个叫做**算符的编时乘积**, 用符号 T 表示. 这样, 方程 (6.21) 可改写为

$$\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')\equiv\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t}dt''T[\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')].\tag{6.22}$$

这个结果容易推广,所得的 $\hat{U}$ 的展开式成为

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t}dt_1\cdots\times\int_{t_0}^{t}dt_nT[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)],\tag{6.23}$$

其中 $n=0$ 的项正是单位算符[1]. 方程 (6.23) 的证明如下：考虑这级数的第 n 项. 指标 $t_1\cdots t_n$ 存在有 $n!$ 种可能的时间编序，选取一个特定的顺序，譬如说，$t_1>t_2>t_3\cdots>t_n$. 任何其它的时间顺序对 $\hat{U}$ 作出相同的贡献，这个结果是容易看出的：把傀积分变量 t_i 重新标号，使之与原先的次序一致，然后利用 T 乘积在宗量对换时的对称性

$$T[\cdots\hat{H}_1(t_i)\cdots\hat{H}_1(t_j)\cdots]=T[\cdots\hat{H}_1(t_j)\cdots\hat{H}_1(t_i)\cdots]. \tag{6.24}$$

方程 (6.24) 来自 T 乘积的定义，这定义把时间最迟的算符放在最左边，次最迟算符在次左边的位置，依次类推，而这规定对方程 (6.24) 两边同样适用. 按这方式，方程 (6.23) 重现了方程 (6.19) 的迭代级数.

Heisenberg 图象

Heisenberg 图象中的态矢量定义为

$$|\Psi_H(t)\rangle=e^{i\hat{H}t/\hbar}|\Psi_S(t)\rangle. \tag{6.25}$$

它的时间导数可与 Schrödinger 方程 (6.1) 结合而给出

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_H(t)\rangle=0, \tag{6.26}$$

这表明 $|\Psi_H\rangle$ 是与时间无关的. 既然在 Schrödinger 图象中任意一个矩阵元可写为

$$\langle\Psi'_S(t)|\hat{O}_S|\Psi_S(t)\rangle=\langle\Psi'_H|e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_Se^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi_H\rangle, \tag{6.27}$$

Heisenberg 图象中的一般算符就可写为

$$\hat{O}_H(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_Se^{-i\hat{H}t/\hbar}. \tag{6.28}$$

注意，由于 $\hat{H}$ 和 $\hat{O}_S$ 一般不能对易，因此 $\hat{O}_H(t)$ 是比较复杂

---

1) 方程 (6.23) 有时写成形式上的编时指数函数，

$$\hat{U}(t,t_0)=T\left\{\exp\left[-i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\right]\right\},$$

因为其幂级数展开式逐项地再现方程 (6.23).

的。我们看到 Heisenberg 图象将全部的对时间的依赖性都归之于算符，而相应的态矢量却是与时间无关的。反之，在 Schrödinger 图象中，算符与时间无关，而方程 (6.28) 的时间导数给出

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{O}_S,\hat{H}]e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$= [\hat{O}_H(t),\hat{H}]. \qquad (6.29)$$

这个重要结果决定了在 Heisenberg 图象中任一算符的运动方程，特别是，如 $\hat{O}_S$ 与 $\hat{H}$ 可对易，右边恒为零，则 $\hat{O}_H$ 是运动常数.

方程 (6.28) 可用相互作用图象算符[方程 (6.7)] 改写成

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{O}_I(t)e^{i\hat{H}_0t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \qquad (6.30)$$

而算符 $\hat{U}$ 的形式解 [方程 (6.13)] 给出

$$\hat{O}_H(t) = \hat{U}(0,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}(t,0). \qquad (6.31)$$

此外，各种定义表明

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle,$$

$$\hat{O}_S = \hat{O}_H(0) = \hat{O}_I(0), \qquad (6.32)$$

因此所有三个图象在 $t=0$ 重合. Schrödinger 方程的定态解具有确定的能量，而 Heisenberg 图象中相应的态矢量满足不含时间形式的 Schrödinger 方程

$$\hat{H}|\Psi_H\rangle = E|\Psi_H\rangle. \qquad (6.33)$$

因此这些态矢量是系统的准确的本征态，而对相互作用系统，它自然是非常复杂的. 方程 (6.32) 和算符 $\hat{U}$ 的定义一起导至关系式

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = \hat{U}(0,t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle, \qquad (6.34)$$

这使我们可以用幺正算符 $\hat{U}$ 从 t_0 时刻的相互作用态矢量，来求出这些准确的本征态.

寝渐绝热"加场"

寝渐绝热(以后简称"绝热")加上相互作用这个概念,代表一种数学上的策略，即从无相互作用系统的准确本征态产生出有相互作用系统的准确本征态．因为我们大概总知道无相互作用系统的一切，例如基态、激发态等等,这步骤让我们追踪每个本征态在加上粒子间互作用后的发展．特定地说，我们引入一个新的含时间的哈密顿函数

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + e^{-\varepsilon|t|}\hat{H}_1, \tag{6.35}$$

其中 ε 是一个小的正量．在过去很久和将来很久（即 $t \to \pm\infty$),哈密顿函数都归结为 H_0，而它是可解的问题．在 $t = 0$,H 变为相互作用系统的完全的哈密顿函数．如果 ε 在计算的结尾趋于零，则微扰是无限缓慢地或者说绝热地加上和撤除,那么任何有意义的结果必定是与量 ε 无关的．

哈密顿函数 (6.35) 是一个含时间的问题，它与参数 ε 有关，我们将在相互作用图象中寻找这个解．容易验证，即使在 Schrödinger 图象中 $\hat{H}_1$ 是含时间的，方程 (6.17) 和 (6.23) 也仍然正确,我们立刻得到

$$|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}_\varepsilon(t,t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle, \tag{6.36}$$

这里时间发展算符显示地与 ε 有关,并由下式给出，

$$\hat{U}_\varepsilon(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \times e^{-\varepsilon(|t_1|+\cdots+|t_n|)} T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)]. \tag{6.37}$$

现在令时间 t_0 趋向$-\infty$;方程 (6.35) 表明 $\hat{H}$ 趋向 $\hat{H}_0$.在这个极限下，Schrödinger 图象的态矢量归结为

$$|\Psi_S(t_0)\rangle = e^{-iE_0t_0/\hbar}|\Phi_0\rangle, \tag{6.38}$$

这里 $|\Phi_0\rangle$ 是未微扰哈密顿函数 $\hat{H}_0$ 的某个不含时间的稳定本征态

$$\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = E_0|\Phi_0\rangle, \tag{6.39}$$

而相应的相互作用图象中的态矢量成为

$$|\Psi_I(t_0)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t_0/\hbar}|\Psi_S(t_0)\rangle = |\Phi_0\rangle. \tag{6.40}$$

这样，当 $t_0 \to -\infty$，$|\Psi_I(t_0)\rangle$ 就变为与时间无关；换个方式说，从下列方程也得到同样的结论，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = e^{-\varepsilon|t|}\hat{H}_1(t)|\Psi_I(t)\rangle \to 0 \quad (t \to \pm\infty). \tag{6.41}$$

假如没有微扰，相互作用图象中的这些本征态，作为未微扰的 Schrödinger 方程的定态解，在时间中保持不变. 但是，随着 t 从$-\infty$增大，相互作用就加上了，而方程 (6.36) 决定态矢量在时间中的发展，这样一直到 $t = 0$，这时相互作用达到最大的强度. 对有限的时间 $|t| \ll \varepsilon^{-1}$，前面的结果全部保持正确，特别是，方程 (6.32) 和 (6.34) 保持正确. 这样，我们得到基本的关系式

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = \hat{U}_\varepsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle, \tag{6.42}$$

它用 $\hat{H}_0$ 的本征态表出相互作用系统的准确本征态.

我们现在要问，在 $\varepsilon \to 0$ 的极限下将发生什么？我们是否能得到有限的，有意义的结果？这问题将由下一节证明的 Gell-Mann 和 Low 定理回答.

量子场论中关于基态的 Gell-Mann 和 Low 定理[1)]

Gell-Mann 和 Low 定理容易叙述为：如下面这个量在微扰论的一切级中都存在，

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\hat{U}_\varepsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle} = \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}, \tag{6.43}$$

则它是 $\hat{H}$ 的一个本征态，

1) M. Gell-Mann and F Low, *Phys. Rev*, **84**: 350 (1951).

$$H\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}=E\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}. \tag{6.44}$$

由这个规定得出的本征态是随着相互作用的加上而从$|\Phi_0\rangle$绝热地发展而来的. 如果$|\Phi_0\rangle$是无相互作用系统的基态，则相应的$\hat{H}$的本征态通常是相互作用的基态，但是这决不是必然的. 例如，某些系统的基态能量，不能表示为耦合常数的微扰级数（另一例见习题 7.5）. 把方程（6.44）左乘以态矢量$\langle\Phi_0|$；既然$\hat{H}_0|\Phi_0\rangle=E_0|\Phi_0\rangle$，我们得到结论

$$E-E_0=\frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_1|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}. \tag{6.45}$$

这个定理的紧要点是，当$\varepsilon\to 0$，方程(6.43)的分子和分母各自并不存在. 一个等价的说法是：在$\varepsilon\to 0$的极限下，方程(6.42)变得没有意义；的确，在这一极限下，它的周相像ε^{-1}那样发散. 方程(6.43)的分母起了精确地消除这个无限大周相的作用［见方程(6.51)及下面的讨论］. 因此这定理断言，如果方程(6.43)中的比值存在，则本征态具有确定意义，并具有方程(6.45)所给出的本征值. 现在我们开始讲述 Gell-Mann 和 Low 所给出的证明.

考虑下列表示式，

$$\begin{aligned}(\hat{H}_0-E_0)|\Psi_0(\varepsilon)\rangle&=(\hat{H}_0-E_0)\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle\\&=[\hat{H}_0,\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)]|\Phi_0\rangle.\end{aligned} \tag{6.46}$$

我们将算出右边出现的对易式. 考虑算符$\hat{U}_\varepsilon$的方程(6.37)中的第n项，并且选取n个时间指标的一个任意时间顺序. 可以写出相应的对易式的恒等式

$$\begin{aligned}&[\hat{H}_0,\hat{H}_1(t_i)\hat{H}_1(t_j)\cdots\hat{H}_1(t_k)]\\&\quad\equiv[\hat{H}_0,\hat{H}_1(t_i)]\hat{H}_1(t_j)\cdots\hat{H}_1(t_k)\\&\qquad+\hat{H}_1(t_i)[\hat{H}_0,\hat{H}_1(t_j)]\cdots\hat{H}_1(t_k)+\cdots\\&\qquad+\hat{H}_1(t_i)\hat{H}_1(t_j)\cdots[\hat{H}_0,\hat{H}_1(t_k)].\end{aligned}$$

此外，方程 (6.8) 使我们可以写出

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \hat{H}_1(t)}{\partial t}=[\hat{H}_0,\hat{H}_1(t)]. \tag{6.47}$$

因此，与 $\hat{H}_0$ 组成的每一个对易式各给出相互作用哈密顿函数的一个时间导数：对一切可能的时间顺序，

$$[\hat{H}_0,\hat{H}_1(t_i)\hat{H}_1(t_j)\cdots\hat{H}_1(t_k)]$$
$$=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\partial}{\partial t_2}+\cdots+\frac{\partial}{\partial t_n}\right)\hat{H}_1(t_i)\hat{H}_1(t_j)\cdots\hat{H}_1(t_k).$$

这样，方程 (6.46) 成为

$$(\hat{H}_0-E)|\Psi_0(\varepsilon)\rangle=-\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n-1}\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_n$$
$$\times e^{\varepsilon(t_1+\cdots+t_n)}\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\right)$$
$$\times T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle. \tag{6.48}$$

在推导方程 (6.48) 时，所有的时间导数都拿到了编时符号的外面．这一步成立的理由，可从下面的恒等式看出来

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\right)\theta(t_p-t_q)\theta(t_q-t_r)\cdots\theta(t_u-t_v)\equiv 0,$$

这里 p，q，r，$\cdots$，u，v 是指标 1，2，$\cdots$，n 的任一种排列．这微分最容易用下列表示式算出，

$$\theta(t)=\int_{-\infty}^{t}dt'\delta(t'),$$

它立即给出 $d\theta(t)/dt=\delta(t)=\delta(-t)$．这样，方程 (6.48) 的被积函数可改写为

$$T\left[\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\right)\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)\right]$$
$$=\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\right)T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)].$$

方程 (6.48) 中所有的时间导数项对积分作出相同的贡献，这可用改变傀变量加以证明；因此，我们只保留一项，例如说 $\partial/\partial t_1$，并乘以因子 n. 对 t_1 分部积分：这个步骤导致两项，一项只不过是被积函数在端点的值，另一项来自绝热因子的导数. 我们因而得到

$$(\hat{H}_0 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle = -\hat{H}_1|\Psi_0(\epsilon)\rangle + \epsilon i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}|\Psi_0(\epsilon)\rangle, \qquad (6.49)$$

其中假定 $\hat{H}_1$ 正比于耦合常数 g，以便写出，

$$\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n-1}\frac{1}{(n-1)!}g^n = i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}g^n.$$

用这方法，我们得到一个级数，它又再现了态矢量 $|\Psi_0(\epsilon)\rangle$. 方程 (6.49) 容易改写为

$$(\hat{H} - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle = i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}|\Psi_0(\epsilon)\rangle. \qquad (6.50)$$

把这方程左乘以 $[\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle]^{-1}\langle\Phi_0|$；既然 $\frac{\partial}{\partial g}\langle\Phi_0| = 0$，我们求得

$$\frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_1|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} = i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}\ln\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle$$
$$\equiv E - E_0 = \Delta E. \qquad (6.51)$$

在这里假如让 $\epsilon \to 0$，就会使我们得出 $\Delta E = 0$ 的结论，而这显然是荒唐的. 事实上，振幅 $\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle$ 必定获得一个正比于 $i\epsilon^{-1}$ 的无限大周相，以致 $\epsilon\ln\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle$ 在 $\epsilon \to 0$ 时保持有限[1]. 方程 (6.50) 经处理后可给出

---

1) 参见例如 J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* (*London*), **A240**: 539 (1957).

$$\left(\hat{H}-E_0-i\hbar\varepsilon g\frac{\partial}{\partial g}\right)\frac{|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}$$

$$=\frac{|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}\left[i\hbar\varepsilon g\frac{\partial}{\partial g}\ln\langle\Phi_0|\Psi_0(\varepsilon)\rangle\right],$$

与方程 (6.51) 相结合最终给出

$$(\hat{H}-E)\frac{|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}=i\hbar\varepsilon g\frac{\partial}{\partial g}\left[\frac{|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}\right]. \quad (6.52)$$

现在已可以令 ε 变到零. 根据假定，方程 (6.52) 右边括号中的量在微扰论的一切级，即在 g 的一切级都是有限的，而对 g 的求导不会改变这个性质. 既然右边乘有 ε，当 ε 趋于零时，右边就成为零，这就证明基本的定理

$$(\hat{H}-E)\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\varepsilon)\rangle}=0. \quad (6.53)$$

这个证明同样地适用于量

$$\frac{\hat{U}_\varepsilon(0,+\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(0,+\infty)|\Phi_0\rangle}, \quad (6.54)$$

其中

$$\hat{U}_\varepsilon(0,+\infty)=\hat{U}_\varepsilon^\dagger(+\infty,0).$$

这里，系统是从本征态为 $|\Phi_0\rangle$ 的 $t=+\infty$ “归来”. 如果从 $|\Phi_0\rangle$ 发展出来的态是非简并的，那么这两个定义必定相同. 它们可能差一个周相因子，但是，就连这种可能性也被通常的归一化条件

$$\langle\Phi_0|\left[\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}\right]=1 \quad (6.55)$$

所排除. 这样，对于 $\hat{H}$ 的非简并本征态，

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{U}_\varepsilon(0,+\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(0,+\infty)|\Phi_0\rangle}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}. \quad (6.56)$$

如前所注意到，即使$|\Phi_0\rangle$是无相互作用的基态，从绝热加入相互作用过程所得到的态不一定是真正的基态。 Gell-Mann 和 Low 定理仅仅断言：它是一个本征态；此外，如它是非简并本征态，那么两种方法[方程 (6.56)] 必定给出同一结果.

7. Green 函 数

本节引入 Green 函数的概念[1] (有时称作传播函数)，它在处理多粒子系集时起着基本的作用.

定义

单粒子 Green 函数用方程

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{\langle\Psi_0|T[\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')]|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} \tag{7.1}$$

定义. 其中 $|\Psi_0\rangle$ 是相互作用系统的 Heisenberg 基态，它满足

$$\hat{H}|\Psi_0\rangle = E|\Psi_0\rangle, \tag{7.2}$$

而 $\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t)$ 是 Heisenberg 算符，它对时间的依赖关系为

$$\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \tag{7.3}$$

这里指标 α 和 β 标记场算符的分量；对自旋 1 / 2 的费米子，α 和 β 可取两个值，至于对自旋为 0 的玻色子，则不用指标，因为这样的系统是用一个分量的场描写的. 这里的 T 乘积是方程 (6.22) 中的 T 的推广：

$$T[\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\phi}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')] = \begin{cases} \hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')(t > t'), \\ \pm\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)(t' > t), \end{cases} \tag{7.4}$$

---

1) V. M. Galitskii and A. B. Migdal, *Sov. Phys-JETP*, **7**: 96 (1958); A. Klein and R. Prange, *Phys. Rev.* **112**: 994 (1958); P. C. Martin and J. Schwinger, *Phys. Rev*, **115**: 1342 (1959).

其中对玻色(费米)子采用上面(下面)的符号. 更一般地说，几个算符的 T 乘积把算符按时间增大的顺序从右到左编序，并加上一个因子 $(-1)^P$，其中 P 是费米子算符从原来给定的顺序变到现在的顺序所经过的交换次数. 这个定义与方程(6.22)中的一致，因为 $\hat{H}_1$ 总是包含偶数个费米子场. 方程(7.1)现在可写为

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=\begin{cases}\dfrac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}(t>t'),\\ \pm\dfrac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}(t'>t).\end{cases}\tag{7.5}$$

这 Green 函数是场算符的期待值；它只不过是坐标变量 $\mathbf{x}t$ 和 $\mathbf{x}'t'$ 的函数. 如果 $\hat{H}$ 不含时间，则 G 仅与时间差 $t-t'$ 有关，这从方程(7.2)和(7.3)可以立即得出：

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=\begin{cases}e^{iE(t-t')/\hbar}\dfrac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar}\hat{\phi}^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x}')|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}\\ \qquad\qquad(t>t')\\ \pm e^{-iE(t-t')/\hbar}\dfrac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x}')e^{i\hat{H}(t-t')/\hbar}\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}\\ \qquad\qquad(t'>t).\end{cases}\tag{7.6}$$

这里因子 $\exp[\pm iE(t-t')/\hbar]$ 仅仅是一个复的 c 数，并可从矩阵元中提出来；与此不同的是，在场算符之间的 $\hat{H}$ 必须保持不动，像写出的那样.

与可观察量的关系

研究 Green 函数有几个理由：首先，对 G 求第 n 级微扰论贡献的 Feynman 规则比对场算符其他组合简单. 这个结果将在第 9 节详细讨论. 其次，虽然在方程(7.1)中只表示出基态的期待值，就是失去了许多有关基态的详细信息，但是单粒

于 Green 函数仍包含一些最有意义的可观察性质：

1. 任何单粒子算符在系统基态的期待值.
2. 系统的基态能量.
3. 系统的激发谱.

前两点下面就要论证，第三点则来自 Lehmann 表示，这将在本节较后的地方讨论.

考虑单粒子算符

$$\hat{J} = \int d^3x \hat{\mathcal{J}}(\mathbf{x}),$$

这里 $\hat{\mathcal{J}}(\mathbf{x})$ 是一次量子化算符 $J_{\beta\alpha}(\mathbf{x})$ 的二次量子化密度

$$\hat{\mathcal{J}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha\beta} \hat{\phi}^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x}) J_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x}).$$

这算符密度的基态期待值由下式给出

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mathcal{J}}(\mathbf{x}) \rangle &= \frac{\langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{J}}(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\
&= \lim_{\mathbf{x}' \to \mathbf{x}} \sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \frac{\langle \Psi_0 | \hat{\phi}^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x}') \hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\
&= \pm i \lim_{t' \to t^+} \lim_{\mathbf{x}' \to \mathbf{x}} \sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \\
&= \pm i \lim_{t' \to t^+} \lim_{\mathbf{x}' \to \mathbf{x}} \mathrm{tr}[J(\mathbf{x}) G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')]. \qquad (7.7)
\end{aligned}$$

这里算符 $J_{\beta\alpha}(\mathbf{x})$ 必须作用于取极限 $\mathbf{x}' \to \mathbf{x}$ 之前，因为 J 可能包含对空间导数，例如动量算符. 此外，符号 t^+ 表示比 t 迟一个无限小量的时间，它保证在第三行中的场算符按应有顺序排列[比较方程 (7.5)]. 最后，可以看出，对自旋指标的求和就是矩阵积 JG 的迹，这里用记号 tr 表示迹. 例如，粒子数密度 $\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle$，自旋密度 $\langle \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) \rangle$ 和总动能 $\langle \hat{T} \rangle$ 容易求得为

$$\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle = \pm i \, \mathrm{tr} G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}t^+), \qquad (7.8)$$

$$\langle \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) \rangle = \pm i \, \mathrm{tr}[\boldsymbol{\sigma} G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}t^+)], \qquad (7.9)$$

$$\langle \hat{T} \rangle = \pm i \int d^3x \lim_{\mathbf{x}' \to \mathbf{x}} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \mathrm{tr} G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t^+) \right]. \quad (7.10)$$

现在出现的问题为：是否也可能规定势能为

$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \beta\beta'}} \int d^3x d^3x' \left[\langle \Psi_0 | \hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} \right.$$

$$\left. \times \hat{\phi}_{\beta'}(\mathbf{x}') \hat{\phi}_{\alpha'}(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle \right] \Big/ \left[\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \right], \quad (7.11)$$

并从而定出基态总能量？既然方程 (7.11) 包含 4 个场算符，我们或许以为需要双粒子 Green 函数. 但是，Schrödinger 方程本身包含着势能，这使我们可以用单粒子 Green 函数求出 $\langle \hat{V} \rangle$. 考虑 Heisenberg 场算符 $\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)$，而哈密顿函数是

$$\hat{H} = \sum_\alpha \int d^3x \hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) T(\mathbf{x}) \hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \beta\beta'}} \int d^3x d^3x' \hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{\alpha\alpha', \beta\beta'}$$

$$\times \hat{\phi}_{\beta'}(\mathbf{x}') \hat{\phi}_{\alpha'}(\mathbf{x}). \quad (7.12)$$

因为系集中粒子是全同的就要求相互作用在粒子交换下不变，

$$V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{\alpha\alpha', \beta\beta'} = V(\mathbf{x}', \mathbf{x})_{\beta\beta', \alpha\alpha'}. \quad (7.13)$$

[较规范地说，这样的项是方程 (7.12) 中给出非零贡献的唯一的一类项]. Heisenberg 运动方程 [方程 (6.29)] 将 $\hat{\phi}$ 的时间导数跟 $\hat{\phi}$ 与 $\hat{H}$ 的对易式联系起来

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} [\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{H}] e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (7.14)$$

其中

$$[\hat{\phi}_\alpha, \hat{H}] = \sum_\xi \int d^3z [\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{z}) T(\mathbf{z}) \hat{\phi}_\beta(\mathbf{z})]$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta\beta' \\ \gamma\gamma'}} \int d^3z d^3z' [\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{z}) \hat{\phi}_\gamma^\dagger(\mathbf{z}')$$

$$\times V(\mathbf{z},\mathbf{z}')_{\beta\beta',\gamma\gamma'}\hat{\phi}_{\gamma'}(\mathbf{z}')\hat{\phi}_{\beta'}(\mathbf{z})]. \tag{7.15}$$

现在利用下述很重要的恒等式

$$\begin{aligned}[A,BC] &= ABC - BCA \\ &= ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= \begin{cases}[A,B]C - B[C,A] \\ \{A,B\}C - B\{C,A\},\end{cases}\end{aligned} \tag{7.16}$$

它使我们可以将方程(7.15)或用对易式或用反对易式表示出来. 为确定起见,首先考虑费米子情况,因为它更复杂些. 用正则的反对易关系式[方程(2.3)]容易算出对易式,我们求得

$$\begin{aligned}[\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}),\hat{H}] &= T(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\sum_{\beta\beta'\gamma'} \\ &\times \int d^3z\,\phi^\dagger_\beta(\mathbf{z})V(\mathbf{z},\mathbf{x})_{\beta\beta',\alpha\gamma'}\hat{\phi}_{\gamma'}(\mathbf{x})\hat{\phi}_{\beta'}(\mathbf{z}) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{\beta'\gamma\gamma'}\int d^3z'\,\hat{\phi}^\dagger_\gamma(\mathbf{z}')V(\mathbf{x},\mathbf{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'} \\ &\times \hat{\phi}_{\gamma'}(\mathbf{z}')\hat{\phi}_{\beta'}(\mathbf{x}).\end{aligned} \tag{7.17}$$

在第一个势能项中,改变傀变量 $\beta\to\gamma$, $\beta'\to\gamma'$, $\gamma'\to\beta'$, $\mathbf{z}\to\mathbf{z}'$. 势的对称性[方程(7.13)]和场 $\hat{\phi}$ 的反对易性于是给出

$$\begin{aligned}[\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}),\hat{H}] &= T(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}) + \sum_{\beta'\gamma\gamma'}\int d^3z'\,\hat{\phi}^\dagger_\gamma(\mathbf{z}') \\ &\times V(\mathbf{x},\mathbf{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}\hat{\phi}_{\gamma'}(\mathbf{z}')\hat{\phi}_{\beta'}(\mathbf{x}),\end{aligned} \tag{7.18}$$

而场方程(7.14)成为

$$\begin{aligned}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - T(\mathbf{x})\right]\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t) \\ = \sum_{\beta'\gamma\gamma'}\int d^3z'\,\hat{\phi}^\dagger_{H\gamma}(\mathbf{z}'t)V(\mathbf{x},\mathbf{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'} \\ \times \hat{\phi}_{H\gamma'}(\mathbf{z}'t)\hat{\phi}_{H\beta}(\mathbf{x}t).\end{aligned} \tag{7.19}$$

方程(7.18)和(7.19)对玻色子也是正确的.

用 $\phi^{\dagger}_{Ha}(\mathbf{x}'t')$ 左乘方程 (7.19)，然后取基态期待值

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-T(\mathbf{x})\right]\frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}^{\dagger}_{Ha}(\mathbf{x}'t')\hat{\phi}_{Ha}(xt)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}$$

$$=\sum_{\beta'\gamma\gamma'}\int d^3z'\Big[\langle\Psi_0|\hat{\phi}_{Ha}(\mathbf{x}'t')\hat{\phi}^{\dagger}_{H\gamma}(\mathbf{z}'t)V(\mathbf{x},\mathbf{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}$$

$$\times\hat{\phi}_{H\gamma'}(\mathbf{z}'t)\hat{\phi}_{H\beta'}(\mathbf{x}t)|\Psi_0\rangle\Big]\Big/\Big[\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle\Big],\qquad(7.20)$$

在极限 $\mathbf{x}'\to\mathbf{x}$，$t'\to t^+$ 下，左边等于

$$\pm i\lim_{t'\to t^+}\lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-T(\mathbf{x})\right]G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t').\qquad(7.21)$$

现在我们再对 α 求和并对 $\mathbf{x}$ 积分，这终于给出 [比较方程 (7.11)]

$$\langle\hat{V}\rangle=\pm\frac{1}{2}i\int d^3x\lim_{t'\to t^+}\lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}$$

$$\times\sum_{\alpha}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-T(\mathbf{x})\right]G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t).\qquad(7.22)$$

方程 (7.10) 和 (7.22) 的结合于是单纯用单粒子 Green 函数把基态总能量表出，

$$E=\langle\hat{T}+\hat{V}\rangle=\langle\hat{H}\rangle$$

$$=\pm\frac{1}{2}i\int d^3x\lim_{t'\to t^+}\lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+T(\mathbf{x})\right]\mathrm{tr}G(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')$$

$$=\pm\frac{1}{2}i\int d^3x\lim_{t'\to t}\lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right]\mathrm{tr}G(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t').$$

(7.23)

对于在体积为 V 的大箱中的均匀系，这些表示式取得较简单的形式，这时单粒子 Green 函数可以写为[比较方程(3.1)][1]

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=\sum_{\mathbf{k}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi V}e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}e^{-i\omega(t-t')}G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega).\qquad(7.24)$$

1) 关于均匀系的 G 仅与坐标差 $\mathbf{x}-\mathbf{x}'$ 有关的证明，参看方程 (7.53) 前的讨论.

在极限 $V\to\infty$ 下，对波矢量的求和就成为积分[方程 (3.26)]，

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=(2\pi)^{-4}\int d^3k\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\times e^{-i\omega(t-t')}G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega),\qquad(7.25)$$

方程 (7.8)、(7.23) 和 (7.25) 的结合给出

$$N=\int d^3x\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle=\pm i\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to0^+}\int d^3k\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\mathrm{tr}G(\mathbf{k},\omega),\qquad(7.26)$$

$$E=\pm i\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to0^+}\int d^3k\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\times\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\hbar\omega\right)\mathrm{tr}G(\mathbf{k},\omega).\qquad(7.27)$$

这里收敛因子

$$\lim_{t'\to t^+}e^{i\omega(t'-t)}\equiv\lim_{\eta\to0^+}e^{i\omega\eta}$$

定义了复 ω 平面上适当的迴路；今后凡是出现这个因子时，就隐含着极限 $\eta\to0^+$.

为着某些目的，让方程 (7.27) 中出现 $\hbar\omega-\hbar^2k^2/2m$ 是较为方便的. 这可用下面的技巧作到，这技巧显然是由 Pauli 首先发现，其后又被人多次重新发现[1]. 把哈密顿函数用可变耦合常数 λ 写为

$$\hat{H}(\lambda)=\hat{H}_0+\lambda\hat{H}_1,$$

则

$$\hat{H}(1)=\hat{H}\text{ 而 }\hat{H}(0)=\hat{H}_0,$$

我们试图就任意的 λ 值求解含时间的 Schrödinger 方程：

---

1) 例如见，D. Pines "Many-Body Problem" p. 43, W. A. Benjamin, Inc, New York, 1961; T. D. Schultz "Quantum Field Theory and the Many-Body Problem" p. 18, Gordon and Breach, Science Publishers, 1964.

$$\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle, \tag{7.28}$$

这里态矢量假定是归一化的，即

$$\langle\Psi_0(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle = 1.$$

方程 (7.28) 与 $\langle\Psi_0(\lambda)|$ 的标量积立即给出

$$E(\lambda) = \langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle,$$

而它对参数 λ 的导数为

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\lambda}E(\lambda) &= \left\langle\frac{d\Psi_0(\lambda)}{d\lambda}\middle|\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\right\rangle \\ &\quad + \left\langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}(\lambda)\middle|\frac{d\Psi_0(\lambda)}{d\lambda}\right\rangle \\ &\quad + \langle\Psi_0(\lambda)|\frac{d\hat{H}(\lambda)}{d\lambda}|\Psi_0(\lambda)\rangle \\ &= E(\lambda)\frac{d}{d\lambda}\langle\Psi_0(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle + \langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle \\ &= \langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle, \end{aligned} \tag{7.29}$$

这里在得出最后一行时用了归一化条件. 把方程(7.29)对 λ 从零到一积分，并注意到 $E(0) = E_0$ 和 $E(1) = E$，

$$E - E_0 = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\langle\Psi_0(\lambda)|\lambda H_1 \cdot |\Psi_0\rangle. \tag{7.30}$$

这里基态能量的移动是单纯用相互作用 $\lambda\hat{H}_1$ 的矩阵元表出的. 遗憾的是需要耦合常数一切值 ($0 \leqslant \lambda \leqslant 1$) 下的这个矩阵元. 在通常情况，$\hat{H}_1$ 代表势能[方程 (7.12)]，方程 (7.22) 和 (7.30) 的结合给出

$$\begin{aligned}E - E_0 = \pm\frac{1}{2}i\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d^3x \lim_{t'\to t}\lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}} \\ \times\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - T(\mathbf{x})\right]\mathrm{tr}G^\lambda(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t'),\end{aligned} \tag{7.31}$$

而均匀系统相应的表示式为

$$E - E_0 = \pm\frac{1}{2} i \frac{V}{(2\pi)^4}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int d^3k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\eta} \times \left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) \mathrm{tr}G^\lambda(\mathbf{k}, \omega). \tag{7.32}$$

例：自由费米子

作为上面的理论的一个例子，考虑费米子的无相互作用的均匀系统的 Green 函数. 先作正则变换，变到粒子和空穴，这将是方便的. 场的定义 [比较方程 (2.1) 和 (3.1)] 为，

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) c_{\mathbf{k}\lambda}, \tag{7.33}$$

其中重新定义费米子算符 $c_{\mathbf{k}\lambda}$ 为[1)]

$$c_{\mathbf{k}\lambda} = \begin{cases} a_{\mathbf{k}\lambda} & (k > k_F, \text{ 粒子}), \\ b^\dagger_{-\mathbf{k}\lambda} & (k < k_F, \text{ 空穴}), \end{cases} \tag{7.34}$$

这是正则变换，它保持着反对易规则

$$\{a_k, a^\dagger_{k'}\} = \{b_k, b^\dagger_{k'}\} = \delta_{kk'}. \tag{7.35}$$

因而使物理情况不变. 这里 a 与 b 彼此之间显然是反对易的，因为它们所涉及的是不同的模. $a^\dagger$ 和 a 算符分别在 Fermi 海以上的能级产生和消灭粒子，而 $b^\dagger$ 和 b 算符分别在 Fermi 海内产生和消灭空穴，如从方程(7.34)所显见. 现在，场可用这些新算符改写为

$$\hat{\psi}_S(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda > k_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{\mathbf{k}\lambda < k_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) b^\dagger_{-\mathbf{k}\lambda}, \tag{7.36}$$

$$\hat{\psi}_I(\mathbf{x}t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda > k_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t} a_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{\mathbf{k}\lambda < k_F} \psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t} b^\dagger_{-\mathbf{k}\lambda}, \tag{7.37}$$

这里第一个方程是在 Schrödinger 图象中，而第二个方程是在

1) 从填满的 Fermi 海中减少一个具有动量为 $+\mathbf{k}$ 的粒子就意味着系统具有动量 $-\mathbf{k}$. 关于空穴态的自旋的适当解释见第 56 节.

相互作用图象中．方程 (7.36) 和 (7.37) 的差别仅在于相互作用图象中包括了一个与时间有关的复周相．相应地，哈密顿函数成为

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_k c^\dagger_{k\lambda} c_{\mathbf{k}\lambda}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\lambda > k_F} \hbar\omega_k a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda} - \sum_{\mathbf{k}\lambda < k_F} \hbar\omega_k b^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{k\lambda < k_F} \hbar\omega_k \qquad (7.38)$$

(粒子)　　(空穴)　　(填满的 Fermi 海).

在粒子和空穴都没有时，能量是填满的 Fermi 海能量．产生空穴使能量降低，而产生粒子则升高能量．但是，如果费米子总数固定，粒子和空穴就必须成对出现．每一个粒子空穴对有净的正能量，这表明填满的 Fermi 海是基态．

根据定义，无相互作用费米子的 Green 函数由下式给出

$$iG^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \langle \Phi_0 | T[\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}t)\psi^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'t')] | \Phi_0 \rangle, \qquad (7.39)$$

上式的无相互作用基态矢量假定是归一化的，上标 0 表示这是无相互作用的 Green 函数．现在注意粒子和空穴的消灭算符二者都使基态湮灭

$$b_{\mathbf{k}\lambda}|\Phi_0\rangle = a_{\mathbf{k}\lambda}|\Phi_0\rangle = 0, \qquad (7.40)$$

因为在状态 $|\Phi_0\rangle$ 中，Fermi 海以上既没有粒子，Fermi 海内也没有空穴．方程 (7.40) 表明粒子-空穴记号的效用．余下的项，对每一时间顺序都容易算出，我们求得

$$iG^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \delta_{\alpha\beta} V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\omega_k(t-t')}$$

$$\times [\theta(t-t')\theta(k-k_F)$$

$$- \theta(t'-t)\theta(k_F-k)], \qquad (7.41)$$

这里出现因子 $\delta_{\alpha\beta}$，因为对自旋态的求和是完全的．在无限大体积的极限下，对 $\mathbf{k}$ 的求和成为积分

$$iG^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \delta_{\alpha\beta}(2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{i\omega_k(t-t')}$$

$$\times [\theta(t-t')\theta(k-k_F)$$
$$-\theta(t'-t)\theta(k_F-k)]. \tag{7.42}$$

现在引入阶跃函数的积分表示是有用的，

$$\theta(t-t') = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta}. \tag{7.43}$$

方程(7.43)容易如下验证：如 $t > t'$，则迴路必须在下半 ω 平面闭合，这包围了单极点 $\omega = -i\eta$，其留数为 -1. 如 $t < t'$，则迴路必须在上半 ω 平面闭合因而给出零，因为被积函数没有 $\mathrm{Im}\omega > 0$ 的奇点. 方程 (7.43) 与方程 (7.42) 合起来给出

$$G^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = (2\pi)^{-4} \int d^3k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\omega(t-t')}$$
$$\times \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right], \tag{7.44}$$

这立即给出

$$G^0_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right]. \tag{7.45}$$

读者直接验证方程 (7.44) 确实可得出方程 (7.42)，以及方程 (7.45) 给出 $\langle \hat{N} \rangle$ 的正确数值 [方程 (7.26)] 和 $E \equiv E_0$ [方程(7.27)]，这是有教益的. 方程(7.45)也可由计算方程(7.42)的 Fourier 变换而直接推得，这时在 (7.42) 中需要 $\pm i\eta$ 项以使时间积分收敛.

Lehmann 表示[1)]

单粒子 Green 函数的某些特点直接来自量子力学基本原

1) H. Lehmann *Nuovo Cimento*, **11**: 342 (1954). 我们的论述遵循 V. M. Galitskii and A. B. Migdal, 前引文和 A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinskii, "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics," sec. 7, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1963.

理，因而与相互作用的特定形式无关．这一节专用于这种一般性质．虽然最后的表示式在形式上既能应用于玻色子也能应用于费米子，但是在 $T=0$ 存在着 Bose 凝聚，要引起新的复杂性(见第六章)，所以在以下两个小节我们只考虑费米子．准确的 Green 函数由下式给出

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=\langle\Psi_0|T[\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')]|\Psi_0\rangle,\tag{7.46}$$

这里假定基态是归一化的 $[\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle=1]$．一般说，这个式子中的 Heisenberg 场算符和态矢量是很复杂的．尽管如此，还是有可能导出某些有意思的一般结果．在场算符之间插入 Heisenberg 态的完全集合；这些态是完整的哈密顿函数的本征态，并且包含一切可能数目的粒子．方程 (7.46) 右边成为

$$\begin{aligned}iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=\sum_n[&\theta(t-t')\langle\Psi_0|\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)|\Psi_n\rangle\\&\times\langle\Psi_n|\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')|\Psi_0\rangle\\&-\theta(t'-t)\langle\Psi_0|\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')|\Psi_n\rangle\\&\times\langle\Psi_n|\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)|\Psi_0\rangle.\end{aligned}\tag{7.47}$$

每一个 Heisenberg 算符可以改写为如下形式

$$\hat{O}_H(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}^S e^{-i\hat{H}t/\hbar},$$

这使我们得以把这些矩阵元对时间的依赖性弄成为显示的，

$$\begin{aligned}iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=\sum_n[&\theta(t-t')e^{-i(E_n-E)(t-t')/\hbar}\\&\times\langle\Psi_0|\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\phi}^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x}')|\Psi_0\rangle\\&-\theta(t'-t)e^{i(E_n-E)(t-t')/\hbar}\\&\times\langle\Psi_0|\hat{\phi}^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x}')|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})|\Psi_0\rangle].\end{aligned}\tag{7.48}$$

作为预备步骤，我们要证明：如果态$|\Psi_0\rangle$含有N个粒子，则 $|\Psi_n\rangle$ 含有$N\pm1$个粒子．粒子数算符具有如下形式

$$\hat{N} = \sum_{\alpha} \int d^3x \hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x}),$$

它与场算符的对易式容易算出为（无论是对玻色子还是费米子）

$$[\hat{N}, \hat{\phi}_{\beta}(\mathbf{z})] = -\phi_{\beta}(\mathbf{z}),$$

或等价地，

$$\hat{N}\hat{\phi}_{\beta}(\mathbf{z}) = \hat{\phi}_{\beta}(\mathbf{z})(\hat{N} - 1).$$

将最后这个算符关系式作用于态$|\Psi_0\rangle$：

$$\hat{N}[\hat{\phi}_{\beta}(\mathbf{z})|\Psi_0\rangle] = (N-1)[\hat{\phi}_{\beta}(\mathbf{z})|\Psi_0\rangle], \quad (7.49)$$

这里我们注意到$|\Psi_0\rangle$是粒子数算符的本征态，其本征值为N. 这样，场$\hat{\phi}$作用于态$|\Psi_0\rangle$给出粒子数算符的本征态，其粒子数少一. 类似地，算符$\hat{\phi}^{\dagger}$使粒子数加一. 方程(7.48)于是包含了通常的 Schrödinger 方程所没有的一个新特点，因为现在我们必须考虑具有不同粒子数的系集.

直到这里，除了假定$\hat{H}$是与时间无关外，讨论一直是完全一般的. 虽然不作进一步的限制而继续这种分析是可能的，但现在我们只考虑具有平移不变性的较简单情况. 这就可推出，产生空间位移的动量算符与$\hat{H}$可对易. 对这样的系统，用方程(3.1)的平面波作为基底是很自然的，而动量算符由下式给出

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\alpha} \int d^3x \hat{\phi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x})(-i\hbar\nabla)\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\mathbf{k} c_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (7.50)$$

$\hat{\mathbf{P}}$与场算符$\hat{\phi}$(不论是玻色子还是费米子)的对易式容易算出为

$$-i\hbar\nabla\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x}) = [\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \hat{\mathbf{P}}], \quad (7.51)$$

它也可改写成积分形式

$$\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}) = e^{-i\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{x}/\hbar}\hat{\phi}_\alpha(0)e^{i\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{x}/\hbar}. \tag{7.52}$$

既然 $\hat{\mathbf{P}}$ 是运动积分，态的完全集合也可认为是动量的本征态。因此我们把方程 (7.48) 的矩阵元对 $\mathbf{x}$ 的依赖关系提出来，

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \sum_n [&\theta(t-t')e^{-i(E_n-E)(t-t')/\hbar}e^{i\mathbf{P}_n\cdot(\mathbf{X}-\mathbf{X}')/\hbar} \\ &\times \langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\phi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle \\ &-\theta(t'-t)e^{i(E_n-E)(t-t')/\hbar} \\ &\times e^{-i\mathbf{P}_n\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}\langle\Psi_0|\hat{\phi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_n\rangle \\ &\times \langle\Psi_n|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle], \end{aligned} \tag{7.53}$$

这里我们注意到了 $\hat{\mathbf{P}}|\Psi_0\rangle = 0$. 方程 (7.53) 使 G 只与变量 $\mathbf{x}-\mathbf{x}'$ 和 $t-t'$ 有关这一点成为明显的[1]. 相应的 Fourier 变换是

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) &= \int d^3(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\int d(t-t')e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}e^{i\omega(t-t')} \\ &\quad\times G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \\ &= V\sum_n \delta_{\mathbf{k},\mathbf{P}_n/\hbar}\frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\phi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\omega-\hbar^{-1}(E_n-E)+i\eta} \\ &\quad+V\sum_n \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{P}_n/\hbar}\frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\omega+\hbar^{-1}(E_n-E)-i\eta}. \end{aligned} \tag{7.54}$$

这里为了保证对 $t-t'$ 的积分收敛，又必需 $+i\eta$. 在第一(第二)项中，贡献为零，除非态 $|\Psi_n\rangle$ 的动量对应于波数 $\mathbf{k}(-\mathbf{k})$，这可用来限制中间态:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = V\sum_n\left[\frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha(0)|n, \mathbf{k}\rangle\langle n, \mathbf{k}|\hat{\phi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\omega-\hbar^{-1}(E_n-E)+i\eta}\right.$$

1) 对于许多问题，假定相互作用粒子相对于固定参考系运动是比较方便的. 例如，在晶态固体和原子中的相互作用电子的问题中，晶体点阵和重原子核就提供了这种固定参考系. 在这情况下，相互作用粒子的 $\hat{\mathbf{P}}$ 不再与 $\hat{H}$ 可对易，因而 Green 函数可能依赖于 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x}'$. 这个较复杂的情况将在第十五章讨论.

$$+\frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\beta^\dagger(0)|n,-\mathbf{k}\rangle\langle n,-\mathbf{k}|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\omega+\hbar^{-1}(E_n-E)-i\eta}\Big].$$

(7.55)

这样，量子力学的一般原理使我们能展示 Green 函数对频率的依赖关系，因为ω现在仅出现在这个求和的分母里.

稍微细致些考察这些分母是有益的. 在第一个求和中，中间态有 $N+1$ 个粒子，分母可写为

$$\begin{aligned}&\omega-\hbar^{-1}[E_n(N+1)-E(N)]\\&\quad=\omega-\hbar^{-1}[E_n(N+1)-E(N+1)]\\&\qquad-\hbar^{-1}[E(N+1)-E(N)].\end{aligned}\tag{7.56}$$

现在 $E(N+1)-E(N)$ 是添加一个粒子到系统中引起基态能量的改变量. 既然系统的体积恒定，能量的这个改变量就是化学势[比较方程 (4.3)]. 此外，量 $E_n(N+1)-E(N+1)\equiv\varepsilon_n(N+1)$ 是 $N+1$ 个粒子系统的激发能;按定义，$\varepsilon_n(N+1)$ 大于或等于零. 类似地，第二项的分母也可写成

$$\begin{aligned}&\omega+\hbar^{-1}[E_n(N-1)-E(N)]\\&\quad=\omega-\hbar^{-1}[E(N)-E(N-1)]\\&\qquad+\hbar^{-1}[E_n(N-1)-E(N-1)]\\&\quad=\omega-\hbar^{-1}\mu+\hbar^{-1}\varepsilon_n(N-1),\end{aligned}\tag{7.57}$$

这是因为 $E(N)-E(N-1)$ 又是化学势 μ，只相差一些数量级为 N^{-1} 的改正量. 的确，从热力学极限的定义($N\to\infty$，$V\to\infty$，但 N/V 是常数) 就可得到

$$\mu(N+1)=\mu(N)+O(N^{-1}).\tag{7.58}$$

虽然我们并不试图一般地证明这个关系式，但对零温度下自由 Fermi 气体是容易论证的. 这时，Pauli 原理进一步保证 $\mu=\varepsilon_F^0$. 方程 (7.56) 和(7.57) 现在可与方程(7.55)结合以给出 Lehmann 表示

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega)=\hbar V\sum_n\left[\frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha(0)|n,\mathbf{k}\rangle\langle n,\mathbf{k}|\hat{\phi}_\beta^\dagger(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu-\varepsilon_{n,\mathbf{k}}(N+1)+i\eta}\right.$$
$$\left.+\frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\beta^\dagger(0)|n,-\mathbf{k}\rangle\langle n,-\mathbf{k}|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu+\varepsilon_{n,-\mathbf{k}}(N-1)-i\eta}\right]. \tag{7.59}$$

在自旋为 1/2 的特例，G 的矩阵结构可能简化. 因为 G 是 2×2 矩阵，它可用单位矩阵和三个 Pauli 自旋矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 组成的完全集合展开. 如果问题中没有占优势的方向，那么 G 在空间旋转下必定是标量. 由于 $\mathbf{k}$ 是唯一可用以和 $\boldsymbol{\sigma}$ 结合的矢量，G 必须取形式

$$G(\mathbf{k},\omega)=a\mathbf{I}+b\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k}.$$

这里因为 G 在旋转下不变，所以 a 和 b 是 $\mathbf{k}^2$ 和 ω 的函数. 此外，如果哈密顿函数在空间反演下不变，则 G 必定也有这个性质；但是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{k}$ 在空间反演下是赝标量，因此系数 b 必须为零. 这样，如果哈密顿函数和基态在空间旋转和反演下不变，则 Green 函数具有如下矩阵结构

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega)=\delta_{\alpha\beta}G(\mathbf{k},\omega)=\delta_{\alpha\beta}G(|\mathbf{k}|,\omega), \tag{7.60}$$

即正比于单位矩阵.

用方程(7.59)重新表述上面的自由 Fermi 系的 $G^0(\mathbf{k},\omega)$ 的表示式[方程 (7.45)]，这是有教益的. 对方程 (7.59) 第一项，加进的粒子必须处于 Fermi 海以上的能级，场算符的矩阵元成为

$$\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha(0)|n,\mathbf{k}\rangle\langle n,\mathbf{k}|\hat{\phi}_\beta^\dagger(0)|\Psi_0\rangle$$
$$\to V^{-1}\delta_{\alpha\beta}\theta(k-k_F). \tag{7.61}$$

在这项的分母中，激发能是加进的粒子的实际能量和这粒子假如在 Fermi 面所具有的能量之差. 这样，能量差由下式给出

$$E_{\mathbf{k}}(N+1)-E(N+1)=\varepsilon_{\mathbf{k}}(N+1)$$

$$\to \epsilon^0_{\mathbf{k}} - \epsilon^0_F = \frac{\hbar^2(k^2 - k_F^2)}{2m}.$$

方程 (7.59) 的第二项明显地对应于 Fermi 面以下的一个空穴，场算符矩阵元成为

$$\langle \Psi_0 | \hat{\psi}^\dagger_\beta(0) | n, -\mathbf{k} \rangle \langle n, -\mathbf{k} | \hat{\psi}_\alpha(0) | \Psi_0 \rangle \to V^{-1}\delta_{\alpha\beta}\theta(k_F - k).$$

使一个粒子从 Fermi 面沉下并填充这个空穴便达到 $N-1$ 粒子系统的基态；因此在第二项的分母中的能量差由下式给出

$$E_{-\mathbf{k}}(N-1) - E(N-1) \equiv \epsilon_{-\mathbf{k}}(N-1)$$

$$\to \epsilon^0_F - \epsilon^0_{-\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2(k_F^2 - k^2)}{2m}.$$

因为对于无相互作用系统，$\mu = \epsilon^0_F$，我们就得到方程(7.45).

如前面注意到的，方程 (7.59) 展示了准确的 Green 函数对频率 ω 的依赖关系，因而研究这个函数的解析性质是有意思的. 关键性的事实是，函数 $G(\mathbf{k}, \omega)$ 为 $\hbar\omega$ 的半纯函数，单极点在对应于动量 $\hbar\mathbf{k}$ 的相互作用系统的准确激发能处. 对低于 $\mu/\hbar$ 的频率，这些奇点略为高于实轴，而对高于 $\mu/\hbar$ 的频率，这些奇点略为低于实轴 (比较图 7.1). 按这方式，Green 函数的奇点立即给出分子不为零的那些激发态的能量. 对于相互作用系统，场算符将系统的基态和含有 $N \pm 1$ 个粒子的许许多多激发态相联系. 但是，对于无相互作用系统，场算符只将一个状态与基态相联系，因而 $G^0(\mathbf{k}, \omega)$ 只有一个极

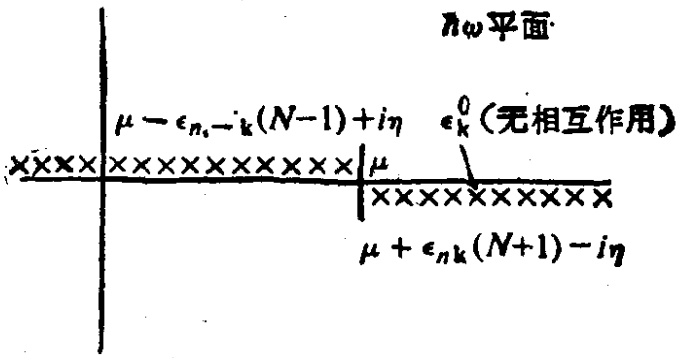


图 7.1 复 $\hbar\omega$ 平面上 $G(\mathbf{k}, \omega)$ 的奇点.

点，如 $k > k_F$，它位于 $\hbar\omega = \hbar^2k^2/2m$ 而略低于实轴；如 $k < k_F$，它位于同一个 $\hbar\omega$ 值而略高于实轴

从这一讨论清楚地看出，Green 函数 G 既不在 ω 的上半平面解析，也不在 ω 的下半平面解析．然而，就迴路积分而言，有用的是考虑在半平面内（上半平面，或下半平面）解析的函数．因此我们定义一对新的函数，称为推迟或超前 Green 函数，

$$\begin{cases} iG^R_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \langle\Psi_0|\{\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t), \\ \qquad\qquad \hat{\psi}^\dagger_{H\beta}(\mathbf{x}'t')\}|\Psi_0\rangle\theta(t-t'), \\ iG^A_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \langle\Psi_0|\{\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t), \\ \qquad\qquad \hat{\psi}^\dagger_{H\beta}(\mathbf{x}'t')\}|\Psi_0\rangle\theta(t'-t), \end{cases} \tag{7.62}$$

上式的曲括弧表示反对易式．这些函数的分析完全按照编时 Green 函数那样进行．对于均匀系统，我们得到下列 Fourier 变换的 Lehmann 表示：

$$G^{R,A}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \hbar V \sum_n \left[\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\alpha(0)|n, \mathbf{k}\rangle\langle n, \mathbf{k}|\hat{\psi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega - \mu - \varepsilon_{n,\mathbf{k}}(N+1) \pm i\eta} + \frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}^\dagger_\beta(0)|n, -\mathbf{k}\rangle\langle n, -\mathbf{k}|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega + \mu + \varepsilon_{n,-\mathbf{k}}(N-1) \pm i\eta} \right]. \tag{7.63}$$

注意 Fourier 变换 $G^R(\mathbf{k}, \omega)$ 和 $G^A(\mathbf{k}, \omega)$ 也是 ω 的半纯函数．但是 $G^R(\mathbf{k}, \omega)$ 的所有极点都位于下半平面，因而 $G^R(\mathbf{k}, \omega)$ 对 $\mathrm{Im}\omega > 0$ 是解析的；反之，$G^A(\mathbf{k}, \omega)$ 的所有极点都位于上半平面，因而 $G^A(\mathbf{k}, \omega)$ 对 $\mathrm{Im}\omega < 0$ 是解析的．对实的 ω，这两个函数有简单的关系

$$[G^R_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)]^* = G^A_{\beta\alpha}(\mathbf{k}, \omega), \tag{7.64}$$

这里 * 号表示复共轭．推迟和超前 Green 函数相互之间的差别以及与编时 Green 函数的差别仅在于收敛因子 $\pm i\eta$，它在靠近奇点处是重要的．如果 ω 是实的且大于 $\hbar^{-1}\mu$，则方程

(7.59)和(7.63)的第二项中的无限小的虚部 $\pm i\eta$ 不起作用. 因此我们作出结论，在复 ω 平面的这个有限制的区域中，

$$G^{R}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) = G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) \quad (\hbar\omega \text{ 为实的且} > \mu). \tag{7.65 a}$$

类似地，

$$G^{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) = G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) \quad (\hbar\omega \text{ 为实的且} < \mu). \tag{7.65 b}$$

如前面所注意到的，$G_{\alpha\beta}$ 通常是对自旋指标对角的：$G_{\alpha\beta} = G\delta_{\alpha\beta}$. 在同样的假设下，推迟和超前 Green 函数也是对角的，我们可以解出 G，因为

$$G = (2s+1)^{-1}\sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha} \equiv (2s+1)^{-1}G_{\alpha\alpha},$$

其中约定重复指标应求和.

如果相邻能级的间隔由典型值 $\Delta\varepsilon$ 表征，则只有时间区间比 $\hbar/\Delta\varepsilon$ 长，才能够把分立的能级结构分辨出来. 反过来说，如果观察持续了典型的时间值 τ，则相应的能量分辨率是 $\hbar/\tau$ 的数量级. 既然宏观样品的 $\Delta\varepsilon$ 很小，接近为零，通常总能满足条件 $\Delta\varepsilon \ll \hbar/\tau$，因而我们只能检测到能量间隔 $\hbar/\tau$ 上的平均能级密度. 在宏观系统的热力学极限下，不连续变量 n 就可用连续变量代替. 如果 dn 表示小的能量间隔 $\varepsilon < \varepsilon_{n,\mathbf{k}} < \varepsilon + d\varepsilon$ 中的能级数目，则方程(7.59)和(7.63)中的求和可改写为

$$\begin{aligned}
&(2s+1)^{-1}V\sum_{n}|\langle n,\mathbf{k}|\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(0)|\Psi_0\rangle|^2\cdots \\
&\quad\approx (2s+1)^{-1}V\int dn|\langle n,\mathbf{k}|\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(0)|\Psi_0\rangle|^2\cdots \\
&\quad= (2s+1)^{-1}V\int d\varepsilon|\langle n,\mathbf{k}|\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(0)|\Psi_0\rangle|^2\frac{dn}{d\varepsilon}\cdots \\
&\quad\equiv \hbar^{-1}\int d\varepsilon A(\mathbf{k},\varepsilon\hbar^{-1})\cdots,
\end{aligned} \tag{7.66 a}$$

与

$$(2s+1)^{-1}V\sum_{n}|\langle n,-\mathbf{k}|\hat{\psi}_{\alpha}(0)|\Psi_0\rangle|^2\cdots$$

$$\equiv\hbar^{-1}\int d\epsilon B(\mathbf{k},\epsilon\hbar^{-1})\cdots, \qquad (7.66\,\mathrm{b})$$

这两式定义了正定的权重函数 $A(\mathbf{k},\epsilon/\hbar)$ 和 $B(\mathbf{k},\epsilon/\hbar)$. 单粒子 Green 函数的相应的 Fourier 变换成为

$$G(\mathbf{k},\omega)=\int_0^{\infty}d\omega'\left[\frac{A(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\hbar^{-1}\mu-\omega'+i\eta}+\frac{B(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\hbar^{-1}\mu+\omega'-i\eta}\right], \qquad (7.67)$$

现在它在复 ω 平面上有一割线沿着整个实轴. 这样，无限大体积的极限完全改变了 $G(\mathbf{k},\omega)$ 的解析结构，因为分立的极点融合成为一条割线. 凡是个别能级不能分辨的有限系统都由同样的结果描述.

对于推迟和超前 Green 函数的类似分析给出

$$G^{R,A}(\mathbf{k},\omega)=\int_0^{\infty}d\omega'\left[\frac{A(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\hbar^{-1}\mu-\omega'\pm i\eta}+\frac{B(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\hbar^{-1}\mu+\omega'\pm i\eta}\right], \qquad (7.68)$$

这表明，如果 A 和 B 已知，这三个 Green 函数就能得出. 此外，在 ω 为实数时，下列符号恒等式有效，

$$\frac{1}{\omega\pm i\eta}=\mathscr{P}\frac{1}{\omega}\pm i\pi\delta(\omega). \qquad (7.69)$$

它表明 G^{R} 和 G^{A} 满足色散关系

$$\mathrm{Re}G^{\mathrm{R,A}}(\mathbf{k},\omega)=\mp\mathscr{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\frac{\mathrm{Im}G^{\mathrm{R,A}}(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\omega'}, \qquad (7.70)$$

其中 $\mathscr{P}$ 表示 Cauchy 主值. 这个方程对有限系统也成立，那时 $\mathrm{Im}G$ 是一些 δ 函数的和.

对于大的 $|\omega|$，这些 Green 函数都具有简单的渐近行

为．考虑下列反对易式的基态期待值

$$\langle\Psi_0|\{\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}),\hat{\phi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}')\}|\Psi_0\rangle=\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \quad (7.71)$$

类似于方程 (7.53) 的分析表明

$$\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')=(2s+1)^{-1}\sum_n[e^{i\mathbf{P}_n\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}|\langle\Psi_n|\hat{\phi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2$$
$$+e^{-i\mathbf{P}_n\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}|\langle\Psi_n|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2],$$

而它对于 $\mathbf{x}-\mathbf{x}'$ 的 Fourier 变换给出

$$1=(2s+1)^{-1}V\sum_n[|\langle n,\mathbf{k}|\hat{\phi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2$$
$$+|\langle n,-\mathbf{k}|\hat{\phi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2]$$
$$=\int_0^\infty d\omega[A(\mathbf{k},\omega)+B(\mathbf{k},\omega)],$$

这里最后一行是来自方程 (7.66)．对于 $|\omega|\to\infty$，方程 (7.67) 和 (7.68) 给出

$$G(\mathbf{k},\omega)=G^R(\mathbf{k},\omega)=G^A(\mathbf{k},\omega)$$
$$\sim\frac{1}{\omega}\int_0^\infty d\omega'[A(\mathbf{k},\omega')+B(\mathbf{k},\omega')]$$
$$\sim\frac{1}{\omega}\qquad(|\omega|\to\infty), \quad (7.72)$$

这对任意的相互作用系统都保持正确．

Green 函数的物理解释

为了理解单粒子 Green 函数的物理解释，考虑相互作用图象中的态 $|\Psi_I(t')\rangle$，并在点 $(\mathbf{x}',t')$ 加进一个粒子：$\hat{\phi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'t')|\Psi_I(t')\rangle$．虽然这个态一般并不是哈密顿函数的本征态，但它仍按 $\hat{U}(t,t')\hat{\phi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'t')|\Psi_I(t')\rangle$ 在时间中传播．当 $t>t'$，这个态与态 $\hat{\phi}^\dagger_{I\alpha}(\mathbf{x}t)|\Psi_I(t)\rangle$ 是怎样重叠的？

$$\langle\Psi_I(t)|\hat{\phi}_{I\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{U}(t,t')\hat{\phi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'t')|\Psi_I(t')\rangle$$
$$=\langle\Phi_0|\hat{U}(\infty,t)[\hat{U}(t,0)\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{U}(0,t)]\hat{U}(t,t')$$

$$\times [\hat{U}(t',0)\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')\hat{U}(0,t')]\hat{U}(t',-\infty)|\Phi_0\rangle$$
$$= \langle\Psi_0|\hat{\phi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\phi}^{\dagger}_{H\beta}(\mathbf{x}'t')|\Psi_0\rangle,$$

这里用到第 6 节的结果. 这个量正是 $t > t'$ 时的 Green 函数，因此它表征着包含了一个附加粒子的态的传播. 类似地，如 $t < t'$，场算符先在时刻 t 产生一个空穴，然后系统按照完整的哈密顿函数传播. 这些空穴可解释为在时间中逆行的粒子，Feynman 那些著名论文曾讨论它[1]. 在较迟的时刻 t'，在相互作用系统基态找到单个空穴的几率振幅又正好是 $t < t'$ 时的 Green 函数.

现在我们研究这种时间中的传播是怎样与函数 $G(\mathbf{k}, \omega)$ 相联系的，而为了确定起见，我们将只考虑通常的情况，即时间尺度很短，不足以把能级分辨出来[2]. 按照 Fourier 变换的定义，对时间的依赖关系由下式给出

$$G(\mathbf{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega). \qquad (7.73)$$

如 $t > 0$，把迴路变形到 ω 下半平面就可以算出这个积分. 由于 $G(\mathbf{k}, \omega)$ 有相当复杂的解析结构，将方程 (7.73) 分为两部分将是方便的:

$$G(\mathbf{k}, t) = \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega)$$
$$+ \int_{\mu/\hbar}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega). \qquad (7.74)$$

在第一项中 (ω 是实的且 $< \hbar^{-1}\mu$)，$G(\mathbf{k}, \omega)$ 与超前 Green 函数 $G^A(\mathbf{k}, \omega)$ [方程 (7.65b)] 重合，于是积分成为

$$\int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} e^{-i\omega t} G^A(\mathbf{k}, \omega). \qquad (7.75)$$

---

1) R. P. Feynman *Phys. Rev* **76**: 749 (1949); **76**: 769 (1949).

2) 我们的论述遵循 V. M. Galitskii 和 A. B. Migdal，前引文和 A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov，和 I. E. Dzyaloshiskii 前引书.

既然 $G^A(\mathbf{k},\omega)$ 在下半平面是解析的，因而迴路可从 C_1 变形为 C_1'（图 7.2a）. 方程 (7.72) 表明，当 $|\omega| \to \infty$，G^A（和 G^R）的行为有如 ω^{-1}；这样，Jordan 引理[1] 保证在无限远的圆弧的贡献为零，方程 (7.75) 归结为

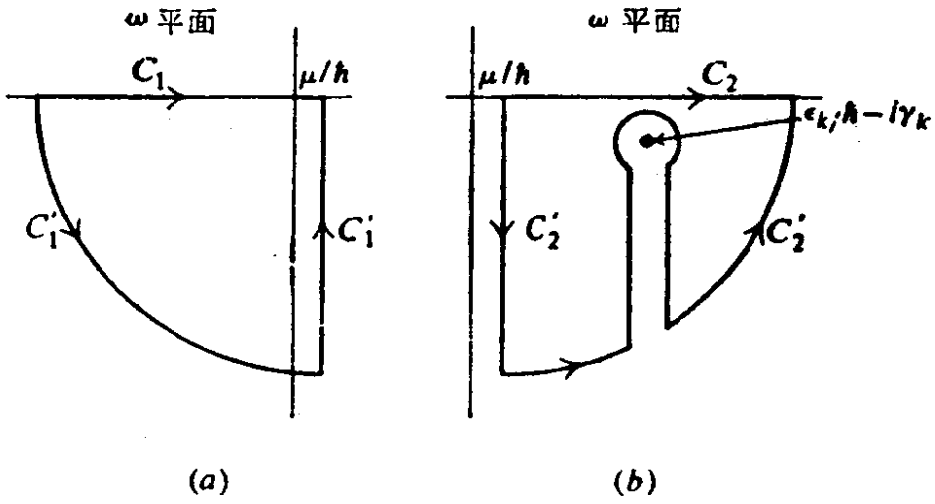


图 7.2　就 $t > 0$ 计算 $G(\mathbf{k},t)$ 时所用的迴路

$$\int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k},\omega) = \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^A(\mathbf{k},\omega). \quad (7.76)$$

方程(7.74)的第二项可类似地处理，因为对于实的 $\omega > \mu/\hbar$，$G(\mathbf{k},\omega)$ 和 $G^R(\mathbf{k},\omega)$ 重合. 但是，有一个重要的新特点，因为 $G^R(\mathbf{k},\omega)$ 在下半 ω 平面不是解析的，而是有奇点的. 为确定起见，我们给相互作用系集作出很初等的模型，并假定 $G^R(\mathbf{k},\omega)$ 在下半平面中有一个紧靠实轴的单极点，就在 $\omega = \hbar^{-1}\varepsilon_k - i\gamma_k$，其留数为 a，其中 $\varepsilon_k > \mu$ 而 $\varepsilon_k - \mu \gg \hbar\gamma_k \geq 0$（假如 G^R 有几个极点，同样的分析分别适用于各个极点）. 迴路 C_2 现在可变形到 C_2'（图 7.2 b），并且在无限远的大圆弧又是没有贡献；方程 (7.74) 的第二项于是成为

1) 参看例如 E. G. Phillips, Functions of a Complex Variable, p. 122, Interscience Publishers, Inc., New York, 1958.

$$\int_{\mu/\hbar}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G(\mathbf{k},\omega)=\int_{\mu/\hbar}^{\mu/\hbar-i\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G^{R}(\mathbf{k},\omega)$$
$$-iae^{-i\varepsilon_k t/\hbar}e^{-\gamma_k t}. \qquad (7.77)$$

方程 (7.76) 和 (7.77) 相结合给出

$$G(\mathbf{k},t)=\int_{\mu/\hbar-i\infty}^{\mu/\hbar}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}[G^{A}(\mathbf{k},\omega)-G^{R}(\mathbf{k},\omega)]$$
$$-iae^{-i\varepsilon_k t/\hbar}e^{-\gamma_k t}. \qquad (7.78)$$

如果 t 既不是太大又不是太小，方程 (7.78) 中的积分可略去，于是包含一个附加粒子的态的传播有如频率为 $\varepsilon_k/\hbar$ 而阻尼常数为 γ_k 的近似本征态. 更精确地说，现在我们将证明，如果

1. $|t|(\varepsilon_k-\mu)\gg\hbar$,
2. $|t|\gamma_k\lesssim 1$,

则[1]

$$G(\mathbf{k},t)\approx -iae^{-i\varepsilon_k t/\hbar}e^{-\gamma_k t}. \qquad (7.79)$$

注意这里暗中假定了条件 $\varepsilon_k-\mu\gg\hbar\gamma_k$，因此极点必定非常靠近实轴. 在这情况下，方程 (7.79) 表明，$G^{R}(\mathbf{k},\omega)$ 向下半平面解析延拓后，极点的实部和虚部确定相互作用基态加上一个粒子而得到的激发态的频率和寿命. 方程 (7.79) 是容易证明的，只要注意到 $\mathrm{Im}\,\omega$ 变得很大且为负值时，方程 (7.78) 的被积函数是指数式地小，所以主要贡献来自靠近实轴的区域. 在实轴上，在极点的邻域中有

$$G^{R}(\mathbf{k},\omega)\approx\frac{a}{\omega-\varepsilon_k/\hbar+i\gamma_k},$$

$$G^{A}(\mathbf{k},\omega)=[G^{R}(\mathbf{k},\omega)]^{*}\approx\frac{a}{\omega-\varepsilon_k/\hbar-i\gamma_k},$$

---

1) 表面上的指数衰减可能引起误解，因为条件 2 限制我们于 $e^{-\gamma t}\approx 1-\gamma t$ 的区域.

这里第二个关系式是由方程(7.64)得来的. 这些关系使我们可以把 $G^R(\mathbf{k},\omega)$ 和 $G^A(\mathbf{k},\omega)$ 解析延拓到复 ω 平面，因而方程 (7.78) 的积分可写为

$$\begin{aligned}
&\int_{\mu/\hbar-i\infty}^{\mu/\hbar}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}[G^A(\mathbf{k},\omega)-G^R(\mathbf{k},\omega)]\\
&\quad\approx 2i\gamma_k a\int_{\mu/\hbar-i\infty}^{\mu/\hbar}\frac{d\omega}{2\pi}\frac{e^{-i\omega t}}{(\omega-\hbar^{-1}\varepsilon_k)^2+\gamma_k^2}\\
&\quad=-\frac{\gamma_k a e^{-i\mu t/\hbar}}{\pi}\int_0^\infty du\,\frac{e^{-ut}}{\gamma_k^2+[\hbar^{-1}(\mu-\varepsilon_k)-iu]^2}\\
&\quad\approx-(\pi t)^{-1}\gamma_k a\hbar^2(\mu-\varepsilon_k)^{-2}e^{-i\mu t/\hbar}\\
&\quad\ll -iae^{-i\varepsilon_k t/\hbar}e^{-\gamma_k t},
\end{aligned}\tag{7.80}$$

这里第三行是用代换 $u=i(\omega-\hbar^{-1}\mu)$ 得到的. 最后的形式是用假设 1 和 2，以及条件 $\gamma_k\ll\hbar^{-1}(\varepsilon_k-\mu)$ 得来的. 注意如 t 太大或太小，方程 (7.80) 最后的不等式失效. 按完全类似的方式，$G^A(\mathbf{k},\omega)$ 向上半 ω 平面解析延拓后的极点确定了在相互作用基态中产生一个空穴(消灭一个粒子)所得的态的频率和寿命.

8. Wick 定 理[1)]

上节定义了单粒子 Green 函数，并展示了它与可观察性质之间的关系. 但是，这个分析决没有解决基本的多体问题，我们还是必须计算非平凡物理系统的 G. 作为一般研究方法，我们用微扰论来算出 Green 函数. 这个步骤在相互作用图象中最易完成，这时各个项可用本节将要推导的一条 Wick 定理列举出来. 本章余下的篇幅(第 9 节)将致力于微扰级数

1) G. C. Wick. *Phys. Rev.*, **80**: 268 (1950).

的图解分析.

Green 函数是由准确的相互作用基态的 Heisenberg 算符的矩阵元所组成. 这个形式对微扰论是不方便的. 现在我们证明一个基本的定理,它将 Heisenberg 算符 $\hat{O}_H(t)$ 的矩阵元与相应的相互作用算符 $\hat{O}_I(t)$ 矩阵元联系起来:

$$\frac{\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}=\frac{1}{\langle\Phi_0|\hat{S}|\Phi_0\rangle}\langle\Phi_0|\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}$$
$$\times\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_\nu e^{-\varepsilon(|t_1|+\cdots|t_\nu|)}$$
$$\times T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_\nu)\hat{O}_I(t)]|\Phi_0\rangle. \quad (8\ 1)$$

这里算符 $\hat{S}$ 定义为

$$\hat{S}=\hat{U}_\varepsilon(\infty,-\infty). \quad (8.2)$$

这定理证明如下: Gell-Mann 和 Low 定理,在相互作用图象中将相互作用系统的基态表示为

$$\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}=\frac{\hat{U}_\varepsilon(0,\pm\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(0,\pm\infty)|\Phi_0\rangle}.$$

在方程(8.1)左边的分母中,把 $\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle$ 写在右边,把 $\hat{U}_\varepsilon(0,\infty)|\Phi_0\rangle$ 写在左边,就可算出这分母

$$\frac{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2}=\frac{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(0,\infty)^\dagger\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2}$$
$$=\frac{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(\infty,0)\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2}$$
$$=\frac{\langle\Phi_0|\hat{S}|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2}, \quad (8.3)$$

这里方程 (6.15) 和 (6.19) 两者都用到了. 按类似的方式,方程 (8.1) 左边的分子借助于方程 (6.31) 变为

$$\frac{\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(\infty,0)\hat{U}_\varepsilon(0,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\varepsilon(t,0)\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}{|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2}$$

$$= \frac{\langle \Phi_0 | \hat{U}_\varepsilon(\infty, t) \hat{O}_I(t) \hat{U}_\varepsilon(t, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{|\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle|^2}. \tag{8.4}$$

在求方程 (8.3) 与方程 (8.4) 的比值时，两式的公分母消去，我们求得

$$\frac{\langle \Psi_0 | \hat{O}_H(t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\langle \Phi_0 | \hat{U}_\varepsilon(\infty, t) \hat{O}_I(t) \hat{U}_\varepsilon(t, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \hat{S} | \Phi_0 \rangle}. \tag{8.5}$$

剩下的问题是要将方程(8.5)右边的分子加以改写，它包含下列算符，

$$\begin{aligned}
&\hat{U}_\varepsilon(\infty, t) \hat{O}_I(t) \hat{U}_\varepsilon(t, -\infty) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_t^\infty dt_1 \cdots \int_t^\infty dt_n e^{-\varepsilon(|t_1| + \cdots + |t_n|)} \\
&\quad \times T[\hat{H}_I(t_1) \cdots \hat{H}_I(t_n)] \hat{O}_I(t) \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \\
&\quad \times \int_{-\infty}^t dt_1 \cdots \int_{-\infty}^t dt_m \\
&\quad \times e^{-\varepsilon(|t_1| + \cdots + |t_m|)} T[\hat{H}_I(t_1) \cdots \hat{H}_I(t_m)],
\end{aligned} \tag{8.6}$$

其中用到方程(6.37). 只要能论证方程(8.1)右边分子中的算符等于方程(8.6)，定理就得到了证明. 在方程(8.1)中的和的第 ν 项，把积分变量分成 n 个 $t_i > t$ 的因子和 m 个 $t_i < t$ 的因子，而 $m + n = \nu$. 作这种划分有 $\nu!/m!n!$ 种方法，对符合条件 $\nu = m + n$ 的所有 m 和 n 值求和就完全地列举出了 ν 重的重积分的积分区域. 因而方程 (8.1) 中的算符成为

$$\begin{aligned}
&\sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \delta_{\nu, m+n} \frac{\nu!}{m!n!} \int_t^\infty dt_1 \cdots \\
&\quad \times \int_t^\infty dt_n e^{-\varepsilon(|t_1| + \cdots + |t_n|)} T[\hat{H}_I(t_1) \cdots \hat{H}_I(t_n)] \hat{O}_I(t) \\
&\quad \times \int_{-\infty}^t dt_1 \cdots \int_{-\infty}^t dt_m e^{-\varepsilon(|t_1| + \cdots + |t_m|)} \\
&\quad \times T[\hat{H}_I(t_1) \cdots \hat{H}_I(t_m)].
\end{aligned} \tag{8.7}$$

这里 Kronecker δ 保证 $m+n=\nu$，但是它也可用于进行对 ν 的求和，这就证明了定理，因为方程 (8.7) 这时归结为方程 (8.6).

按类似的方式，编时 Heisenberg 算符的期待值可写为

$$\frac{\langle\Psi_0|T[\hat{O}_H(t)\hat{O}_H(t')]|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}$$

$$=\frac{1}{\langle\Phi_0|S|\Phi_0\rangle}\langle\Phi_0|\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_\nu e^{-\varepsilon(|t_1|+\cdots+|t_\nu|)}$$

$$\times T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_\nu)\hat{O}_I(t)\hat{O}_I(t')]|\Phi_0\rangle. \quad (8.8)$$

这个结果取决于这样一个事实

$$\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(\infty,0)[\hat{U}_\varepsilon(0,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\varepsilon(t,0)]$$

$$\times[\hat{U}_\varepsilon(0,t')\hat{O}_I(t')\hat{U}_\varepsilon(t',0)]\hat{U}_\varepsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle$$

$$=\langle\Phi_0|\hat{U}_\varepsilon(\infty,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\varepsilon(t,t')\hat{O}_I(t')\hat{U}_\varepsilon(t',-\infty)|\Phi_0\rangle.$$

因此必须把积分变量划分为三个不同的组. 除此以外，证明过程是与方程(8.1)完全一样的. 由于方程(8.1)和(8.8)两者都是由比值组成，发散的周相因子相抵消，因而容许取 $\varepsilon\to 0$ 的极限. 按这最后的形式，这些定理可列在量子场论最有用的结果之中.

作为一个有意思的例子，准确的 Green 函数可写为

$$iG_{\alpha\beta}(x,y)=\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_\nu$$

$$\times\frac{\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_\nu)\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^\dagger_\beta(y)]|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{S}|\Phi_0\rangle}, \quad (8.9)$$

这里引入了记号 $x\equiv(\mathbf{x},x_0)\equiv(\mathbf{x},t_x)$. 因为我们将一直在相互作用图象中进行研究，从这里起今后将略去下标 I. 也

为了方便，将 $\hat{H}_1$ 中的粒子间势改写为

$$U(x_1, x_2) \equiv V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\delta(t_1 - t_2), \tag{8.10}$$

这使我们可以把积分写得对称[1]. 例如，用记号 iG 来表示，方程 (8.9)的分子成为

$$i\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y) \equiv iG^0_{\alpha\beta}(x, y) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \frac{1}{2}$$

$$\times \int d^4x_1 d^4x_1' U(x_1, x_1')_{\lambda\lambda', \mu\mu'} \langle \Phi_0 | T[\hat{\phi}^\dagger_\lambda(x_1)\hat{\phi}^\dagger_\mu(x_1')$$

$$\times \hat{\phi}_{\mu'}(x_1')\hat{\phi}_{\lambda'}(x_1)\hat{\phi}_\alpha(x)\hat{\phi}^\dagger_\beta(y)] | \Phi_0 \rangle + \cdots, \tag{8.11}$$

这里 $iG^0_{\alpha\beta}(x, y) = \langle \Phi_0 | T[\hat{\phi}_\alpha(x)\hat{\phi}^\dagger_\beta(y)] | \Phi_0 \rangle$ 是属于无相互作用系统的. 这个表示式表明我们必须算出形式为

$$\langle \Phi_0 | T[\phi^\dagger \cdots \hat{\phi}\hat{\phi}_\alpha(x)\hat{\phi}^\dagger_\beta(y)] | \Phi_0 \rangle \tag{8.12}$$

的产生和消灭算符的 T 乘积在无相互作用基态中的期待值. 显然，产生和消灭算符必须成对，否则期待值为零；但是，即使在这个最低级的项中，通过直接应用对易或反对易关系式来对所有可能的贡献进行分类，这种作法虽然直截了当却是太冗长了. 我们可以不这样做，而依靠 Wick 定理，它提供了算出这种矩阵元的一般步骤.

基本的想法是，把所有消灭算符移到右边，在那里，它们湮灭无相互作用基态. 在这样做时，我们得到一些附加项，它正比于位置交换所牵涉的算符对易式或反对易式. 对于大多数目的，较方便的是直接用场算符而不是单个模的算符 $\{c_k\}$. 在大多数有意思的系统中，$\hat{\phi}(x)$ 可唯一地分成消灭部分

---

1) Green 函数现在具有协变的外观，诚然，这正是在相对论量子电动力学中所得到的，在那里方程 (8.10) 的相互作用是通过交换电磁场的虚光子而传递的. 唯一的差别是量子电动力学涉及推迟的电磁相互作用，而现在的理论则涉及正比于 δ 函数 $\delta(t_1 - t_2)$ 的一个静态的瞬时势. 但是，应该强调指出：这里发展的理论同样适用于相对论性量子场论，这点在第十二章特别明显，我们在那里将考虑由于光子的交换所引起的非相对论的推迟相互作用.

$\hat{\phi}^{(+)}(x)$ 和产生部分 $\hat{\phi}^{(-)}(x)$，前者湮灭无相互作用的基态[1]

$$\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}^{(+)}(x) + \hat{\phi}^{(-)}(x), \tag{8.13}$$

$$\hat{\phi}^{(+)}(x)|\Phi_0\rangle = 0. \tag{8.14}$$

相应地，其伴随算符成为

$$\hat{\phi}^{\dagger}(x) = \hat{\phi}^{(+)\dagger}(x) + \hat{\phi}^{(-)\dagger}(x), \tag{8.15}$$

这里

$$\hat{\phi}^{(-)\dagger}(x)|\Phi_0\rangle = 0. \tag{8.16}$$

这样，$\hat{\phi}^{(+)}(x)$ 和 $\hat{\phi}^{(-)\dagger}(x)$ 都是消灭部份，而 $\hat{\phi}^{(-)}(x)$ 和 $\hat{\phi}^{(+)\dagger}(x)$ 都是产生部分.这记号是 Wick 定理最初应用于相对论性量子场论所留下的，这里（+）和（—）号指的是 Lorentz 不变地分解成正和负的频率部份. 不过，为了我们的目的，它们可认为是消灭和产生部份的上标. 作为这种分解的显示例子，考虑用方程 (7.34) 的正则变换改写过的自由费米子场：

$$\begin{aligned}\hat{\phi}(x) &= \sum_{\mathbf{k}\lambda>k_F} V^{-\frac{1}{2}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega_k t)}\eta_\lambda a_{\mathbf{k}\lambda} \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}\lambda<k_F} V^{-\frac{1}{2}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega_k t)}\eta_\lambda b^{\dagger}_{-\mathbf{k}\lambda} \\ &\equiv \hat{\phi}^{(+)}(x) + \hat{\phi}^{(-)}(x).\end{aligned} \tag{8.17}$$

在这情况下，符号(+)和(—)可以解释为相对于 Fermi 能来量度的场分量的频率符号.

为了用简明而实用的方式表出 Wick 定理，需要引入一些新的定义.

1. *T* 乘积：场算符的 *T* 乘积已经定义过了[方程(7.4)]. 它把场算符加以编排，使时间最迟的在最左边，而且费米子算符每交换一次要附加一个因子(—1). 按定义，

---

1) 关于凝聚 Bose 系统的处理中所固有的特殊问题的讨论见第六章.

$$T(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots) = (-)^P T(\hat{C}\hat{A}\hat{D}\hat{B}\cdots), \qquad (8.18)$$

其中 P 是使方程(8.18)左边所给定的乘积改排为右边的顺序所需要的费米子算符的置换次数. 显然，在 T 乘积内重排场算符时，可把玻色子场作为对易的来处理，把费米子场作为反对易的来处理.

2. *正规编序*：这个术语代表场算符乘积的另一种编序，所有的消灭算符位于所有的产生算符的右边，并且对于费米算符的每一次交换也计入一个因子(−1). 按定义，

$$N(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots) = (-1)^P N(\hat{C}\hat{A}\hat{D}\hat{B}\cdots), \qquad (8.19)$$

因此正规编序乘积内的场算符也可作为对易的(玻色子)或反对易的(费米子)来处理. 例如，如果处理的是费米子场，

$$N[\hat{\psi}^{(+)}(x)\hat{\psi}^{(-)}(y)] = -\hat{\psi}^{(-)}(y)\hat{\psi}^{(+)}(x),$$
$$N[\hat{\psi}^{(+)}(x)\hat{\psi}^{(+)\dagger}(y)] = -\psi^{(+)\dagger}(y)\psi^{(+)}(x). \qquad (8.20)$$

在这两个情况下，场的产生部份都写在左边，而因子(−1)反映了费米子算符的一次交换. 读者务必就每一个定义写出几个例子.

场算符的正规编序乘积特别方便，因为它*在未微扰基态* $|\Phi_0\rangle$ *中的期待值恒为零*[见方程 (8.14) 和(8.16)]. 即使乘积全由产生部分组成，这结果仍然是正确的，这一点，只要从定义消灭部份的方程的伴随方程来看就清楚了. 这样，算符的 T 乘积的基态期待值[例如方程 (8.12)]可以化为相应的 N 乘积而算出；基本的问题是列举出化为 N 乘积时所引入的附加项. 注意到 T *乘积和* N *乘积都满足分配律*，这个处理就可简化. 例如，

$$N[(\hat{A}+\hat{B})(\hat{C}+\hat{D})\cdots]$$
$$= N(\hat{A}\hat{C}\cdots) + N(\hat{A}\hat{D}\cdots) + N(\hat{B}\hat{C}\cdots)$$
$$+ N(\hat{B}\hat{D}\cdots) + \cdots.$$

因此，在证明各种定理时，只要就产生或消灭部分各自证明就

够了.

3. 收缩：两个算符 $\hat{U}$ 和 $\hat{V}$ 的收缩记作 $\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}$，它等于 T 乘积与 N 乘积之差

$$\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot} \equiv T(\hat{U}\hat{V}) - N(\hat{U}\hat{V}). \tag{8.21}$$

它代表将编时乘积改排为正规编序乘积时所引入的附加项，因而对于算符的不同时序是不一样的. 作为例子，所有下列收缩都为零，

$$\begin{aligned}\hat{\phi}^{(+)\cdot}\hat{\phi}^{(-)\cdot} &= \hat{\phi}^{(+)\dagger\cdot}\hat{\phi}^{(-)\dagger\cdot} = \hat{\phi}^{(+)\dagger\cdot}\hat{\phi}^{(-)\cdot} \\ &= \hat{\phi}^{(+)\cdot}\hat{\phi}^{(-)\dagger\cdot} = 0,\end{aligned} \tag{8.22}$$

因为这些算符的 T 乘积恒等于它们的 N 乘积. 更具体些，考虑方程(8,22)中第一对算符. 它们的 T 乘积由下式给出

$$T[\hat{\phi}^{(+)}(x)\hat{\phi}^{(-)}(y)] \equiv \begin{cases}\hat{\phi}^{(+)}(x)\hat{\phi}^{(-)}(y) & (t_x > t_y), \\ \pm\hat{\phi}^{(-)}(y)\hat{\phi}^{(+)}(x) & (t_y > t_x),\end{cases} \tag{8.23}$$

这里第二行中的±号分别属于玻色子或费米子. 但是场算符 $\hat{\phi}$ 是形式为 $c_k e^{-i\omega_k t}$ 的相互作用图象算符[比较方程 (6.10a)]的线性组合. 这样，对两种统计中的不管那一种，方程 (8.23) 都可改写为

$$T[\hat{\phi}^{(+)}(x)\hat{\phi}^{(-)}(y)] = \pm\hat{\phi}^{(-)}(y)\phi^{(+)}(x), \tag{8.24}$$

因为在任何时候 $\hat{\phi}^{(-)}$ 和 $\hat{\phi}^{(+)}$ 或是对易的或是反对易的. 要注意这个结果只有在相互作用图象中才是正确的，那里算符的性质与 Schrödinger 图象中的一样. 按正规编序乘积的定义，

$$N[\hat{\phi}^{(+)}(x)\hat{\phi}^{(-)}(y)] \equiv \pm\phi^{(-)}(y)\phi^{(+)}(x), \tag{8.25}$$

因此它们的收缩为零

$$\begin{aligned}\hat{\phi}^{(+)}(x)^{\cdot}\hat{\phi}^{(-)}(y)^{\cdot} &\equiv T[\hat{\phi}^{(+)}(x)\hat{\phi}^{(-)}(y)] \\ &\quad - N[\hat{\phi}^{(+)}(x)\hat{\phi}^{(-)}(y)] = 0.\end{aligned} \tag{8.26}$$

方程 (8.22) 中的其它收缩也都为零，因为所有配对的相互作用图象算符彼此对易或反对易.

方程 (8.22) 表明大多数收缩为零. 特别是，两个产生部份或两个消灭部份的收缩为零，仅有的非零收缩由下式给出

$$\begin{cases} \hat{\phi}^{(+)}(x)^{\cdot}\hat{\phi}^{(+)\dagger}(y)^{\cdot} = \begin{cases} iG^0(x,y) & (t_x > t_y), \\ 0 & (t_y > t_x), \end{cases} \\ \hat{\phi}^{(-)}(x)^{\cdot}\hat{\phi}^{(-)\dagger}(y)^{\cdot} = \begin{cases} 0 & (t_x > t_y) \\ iG^0(x,y) & (t_y > t_x). \end{cases} \end{cases} \tag{8.27}$$

对费米子，这个结果的导出是用了产生和消灭算符的正则反对易关系式[方程(1.48)]以及方程(7.41)所给出的自由 Green 函数的定义. 类似的推导适用于非凝聚的玻色子(例如，见第十二章). 注意收缩是占据数 Hilbert 空间中的 c 数，而不是算符. 方程 (8.27) 可从下列事实

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | T(UV) | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | \hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | N(\hat{U}\hat{V}) | \Phi_0 \rangle \\ &= \hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}, \end{aligned} \tag{8.28}$$

而比较简单地导出，因为按定义 $\langle \Phi_0 | N(\hat{U}\hat{V}) | \Phi_0 \rangle$ 为零. 于是，分配律给出场算符本身的收缩

$$\hat{\phi}_\alpha(x)^{\cdot}\hat{\phi}^{\dagger}_\beta(y)^{\cdot} = iG^0_{\alpha\beta}(x,y). \tag{8.29}$$

4. 一个约定： 我们引入关于符号的进一步的约定. 在具有一个以上收缩的场算符的正规编序中，我们将让各个收缩分别使用一对单点上标，或双点上标，三点上标…来标记. 需要改排正规乘积中的算符顺序使被收缩的两个因子靠在一起，改排时要始终遵守标准的关于算符交换的符号规定，然后，被收缩的算符用方程 (8.27) 给出的收缩值来代替. 既然这个收缩现在只不过是坐标变量的函数，它可以提到正规编序乘积的外面.

$$\begin{aligned} N(\hat{A}^{\cdot}\hat{B}\hat{C}^{\cdot}\hat{D}\cdots) &= \pm N(\hat{A}^{\cdot}\hat{C}^{\cdot}\hat{B}\hat{D}\cdots) \\ &= \pm \hat{A}^{\cdot}\hat{C}^{\cdot}N(\hat{B}\hat{D}\cdots). \end{aligned} \tag{8.30}$$

最后，注意

$$\hat{U}\cdot\hat{V}\cdot = \pm\hat{V}\cdot\hat{U}\cdot, \tag{8.31}$$

这是从方程 (8.21) 和 T 乘积及正规乘积的定义得来的. 现在有可能叙述 Wick 定理了.

5. Wick 定理:

$$\begin{aligned} T(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) &= N(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) \\ &\quad + N(\hat{U}\cdot\hat{V}\cdot\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) \\ &\quad + N(\hat{U}\cdot\hat{V}\hat{W}\cdot\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) + \cdots \\ &\quad + N(\hat{U}\cdot\hat{V}\cdot\cdot\hat{W}\cdot\cdot\cdot\cdots\hat{X}\cdot\cdot\cdot\hat{Y}\cdot\cdot\hat{Z}\cdot) \\ &= N(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) \\ &\quad + N\text{(一切可能的收缩对之和)}. \end{aligned} \tag{8.32}$$

定理的基本思想如下: 考虑一个给定的时间顺序, 在场算符的这个乘积内开始将产生部份向左移动. 每当产生部份不能对易或反对易时,这给出一个附加项,而这正是收缩. 允许列入一切可能的收缩, 因为如果产生部份已经在消灭部份的左边,则收缩为零(记住大多数收缩为零);从而这定理明白地列举出了把 T 乘积改排为正规编序乘积时出现的附加项.

为了证明这定理,我们将遵循 Wick 的推导,首先证明下面的基本引理.

6. 基本引理: 如果 $N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})$ 是正规编序乘积, 而 Z 是时间上早于 $\hat{U}$、$\hat{V}$、$\cdots\hat{X}$、$\hat{Y}$ 的一个因子,则

$$\begin{aligned} &N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} \\ &\quad = N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\cdot\hat{Z}\cdot) + N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\cdot\hat{Y}\hat{Z}\cdot) + \cdots \\ &\qquad + N(\hat{U}\cdot\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\cdot) + N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}). \end{aligned} \tag{8.33}$$

这样,如用一个时间较早的任意算符右乘一个正规编序乘积, 我们得到如下各个正规编序乘积之和: 这些正规乘积包含着附加算符依次与原来的乘积中的一个算符之收缩, 还有一项则是包括附加算符的正规编序乘积. 为了证明这引理, 注意

下列各点:

(a) 如果 $\hat{Z}$ 是消灭算符,由于 $T(\hat{A}\hat{Z}) = N(\hat{A}\hat{Z})$, 则所有收缩为零. 这样,在方程(8.33)中只有最后一项作出贡献,引理得证.

(b) 可以认为算符乘积 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 是正规编序的,因为否则总可以把方程两边重新排列. 我们的符号约定保证在方程 (8.33) 的每一项出现同样的符号因子,因而恒相消.

(c) 进一步可认为 $\hat{Z}$ 是产生算符,而 $\hat{U}\cdots\hat{Y}$ 全是消灭算符. 因为如果证明了这种形式下的引理,则产生算符可以通过左乘而包括进来;这时引进的附加收缩恒为零,因此可加在方程 (8.33) 的右边而不改变结果.

因此,只要将 $\hat{Z}$ 当作产生算符,把 $\hat{U}\cdots\hat{Y}$ 当作消灭算符来证明方程 (8.33) 就够了. 证明用归纳法. 按定义 [方程(8.21)], 方程 (8.33) 对于两个算符显然是正确的,

$$\hat{Y}\hat{Z} = T(\hat{Y}\hat{Z}) = \hat{Y}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot} + N(\hat{Y}\hat{Z}). \tag{8.34}$$

现在假设它对 n 个算符是正确的,我们要就 $n+1$ 个算符来证明它是正确的. 将引理(8.33)左乘以时间迟于 $\hat{Z}$ 的另一个消灭算符 $\hat{D}$

$$\begin{aligned}
&\hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})\hat{Z}\\
&\quad = N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})\hat{Z}\\
&\quad = N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot}) + N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}^{\cdot}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot}) + \cdots\\
&\qquad + N(\hat{D}\hat{U}^{\cdot}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot}) + \hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}).
\end{aligned} \tag{8.35}$$

既然 $\hat{U}$、$\hat{V}\cdots\hat{X}$、$\hat{Y}$ 全都是消灭算符,而且 $\hat{Z}$ 与任一个消灭算符的收缩是 c 数,$\hat{D}$ 就放入正规编序中去,不过这要除去方程 (8.35) 的最后一项,那里 $\hat{Z}$ 仍是一个算符. 考虑这最后的项,我们断定它可写为

$$\begin{aligned}
\hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) = {} & N(\hat{D}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot})\\
& + N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}).
\end{aligned} \tag{8.36}$$

这个方程容易验证：

$$\begin{aligned}
&\hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\\
&\quad=(-1)^{P}\hat{D}\hat{Z}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\
&\quad=(-1)^{P}T(\hat{D}\hat{Z})\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\
&\quad=(-1)^{P}\hat{D}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\
&\qquad+(-1)^{P+Q}N(\hat{Z}\hat{D})\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\
&\quad=[(-1)^{P}]^{2}\hat{D}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot}\\
&\qquad+[(-1)^{P+Q}]^{2}N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\\
&\quad=N(\hat{D}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot})\\
&\qquad+N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}).
\end{aligned}\tag{8.37}$$

在第二行的正规编序乘积中，$\hat{Z}$ 已移到左边，这带来符号因子 $(-1)^{P}$，各因子现在是按正规编序排列的，N 乘积的记号可以去掉.此外，乘积 $\hat{D}\hat{Z}$ 根据约定已按时间编序.第四、五行是根据收缩的定义来的，因子 $(-1)^{Q}$ 则是由于 $\hat{D}$ 和 $\hat{Z}$ 的交换.第五行的那一项已按正规编序，因为 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 全是消灭算符. 符号的约定使得可以把算符重排以得到最后那个形式，这就证明了基本引理 (8.33).

这结果可推广到正规编序乘积中已含有场算符的收缩.方程(8.33)两边乘以两个添加的算符的收缩，比如说 $\hat{R}^{\cdot\cdot}\hat{S}^{\cdot\cdot}$，然后在两边都交换算符. 各项的总的符号改变相同，因而恒相消. 这样，基本引理 (8.33) 可改写为

$$\begin{aligned}
&N(\hat{U}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y})\hat{Z}\\
&\qquad=N(\hat{U}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot})+\cdots\\
&\qquad\quad+N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot})\\
&\qquad\quad+N(\hat{U}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y}\hat{Z}).
\end{aligned}\tag{8.38}$$

7. Wick 定理的证明：这定理也用归纳法证明. 按收缩的定义，它对两个算符显然是正确的.

$$T(\hat{U}\hat{V})=N(\hat{U}\hat{V})+\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}.\tag{8.39}$$

假设它对 n 个算符是成立的，然后用时间上早于任何其它算符的算符 $\hat{\Omega}$ 右乘，

$$\begin{aligned} & T(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\hat{\Omega} \\ & \quad = T(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\hat{\Omega}) \\ & \quad = T(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\hat{\Omega} \\ & \qquad + N(\hat{U}\cdot\hat{V}\cdot\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\hat{\Omega} + \cdots \\ & \quad = N(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\hat{\Omega}) \\ & \qquad + N\text{（遍及所有可能收缩对的求和）}. \end{aligned} \tag{8.40}$$

算符 $\hat{\Omega}$ 可以包括在 T 乘积内，因为它的时间早于已在 T 乘积内的任一算符．在右边，应用基本引理(8.33)，将算符 $\hat{\Omega}$ 放在正规编序乘积内．算符 $\hat{\Omega}$ 的时间限制现在可以解除，这只要重排方程 (8.40) 每一项中的算符，关于符号的约定再次在方程的两边给出相同的总的符号，方程因而保持正确．现在 Wick 定理已在算符或是场的产生部分或是消灭部分的假定下证出．不过，T 乘积和正规编序乘积两者都遵从分配律，因而 Wick 定理适用于场本身．

必须强调指出：Wick 定理是一个算符恒等式，它对任意的矩阵元都成立．然而，它的真正用处在于计算基态平均值，$\langle\Phi_0|\cdots|\Phi_0\rangle$，这里所有未收缩的正规编序乘积为零．尤其是，准确的 Green 函数[方程(8,9)]是由一切可能的完全收缩了的项所组成．

9. 微扰论的图解分析

Wick 定理使我们可以将准确的 Green 函数 (8.9) 作为一个微扰展开式算出，展开式只涉及相互作用图象中完全收缩了的场算符．这些收缩恰好是自由 Green 函数 G^0 [方程(8.29)]，从而 G 用含有 U 和 G^0 的级数表出．这个展开式可

直接在坐标空间中分析，或者（对于均匀系）在动量空间中分析．如前面所指出的，凝聚的玻色子的零温度理论需要专门的处理（第六章），本节只讨论费米子．

坐标空间中的 Feynman 图解

作为利用 Wick 定理的一个例子，我们将计算方程（8.11）中的第一级贡献．含有算符正规编序乘积的一切项在无相互作用基态 $|\Phi_0\rangle$ 中的期待值都是零，只剩下完全收缩的场算符乘积．于是 Wick 定理要求遍及一切可能的收缩求和，而方程（8.29）表明，只有在场 $\hat{\phi}_\alpha$ 和伴随场 $\hat{\phi}^\dagger_\beta$ 之间才有非零的收缩．按这方式，方程（8.11）的第一级项为

$$
\begin{aligned}
i\tilde{G}^{(1)}_{\alpha\beta}(x,y) = \frac{-i}{\hbar}\cdot\frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda'\mu\mu'}\int d^4x_1 d^4x_1' U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda'\mu\mu'}
&\times\{iG^0_{\alpha\beta}(x,y)[\underbrace{iG^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')iG^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1)}_{(A)}\\
&-\underbrace{iG^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)iG^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')}_{(B)}]\\
&+iG^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)[\underbrace{iG^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')iG^0_{\mu'\beta}(x_1',y)}_{(C)}\\
&-\underbrace{iG^0_{\lambda'\beta}(x_1,y)iG^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')}_{(D)}]\\
&+iG^0_{\alpha\mu}(x,x_1')[\underbrace{iG^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)iG^0_{\lambda'\beta}(x_1,y)}_{(E)}\\
&-\underbrace{iG^0_{\mu'\beta}(x_1',y)iG^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1)}_{(F)}]\}.
\end{aligned}
\tag{9.1}
$$

请读者务必从方程（8.11）出发，就一切可能的时间顺序列举一切非零贡献以直接得出方程（9.1）．这个作法即使在第一级中也是很复杂的，而 Wick 定理明显地提供了一个强有力而又简单的工具．

我们现在可以将表示式（9.1）中出现的每一项与一个图形联系起来，如图 9.1 所示．Green 函数 G^0 用直线表示，其上带有箭头，箭头从第二个宗量指向第一个宗量，而相互作用

势，用波线表示. 在G的微扰分析中出现的这些图，构成一个方便的方法，用这方法得以将用 Wick 定理所得到的各项分类. 它们称为 Feynman 图解，因为 Feynman 在他的量子电动力学论文中[1] 最早发展了这种形式的图解展开. 它与量子

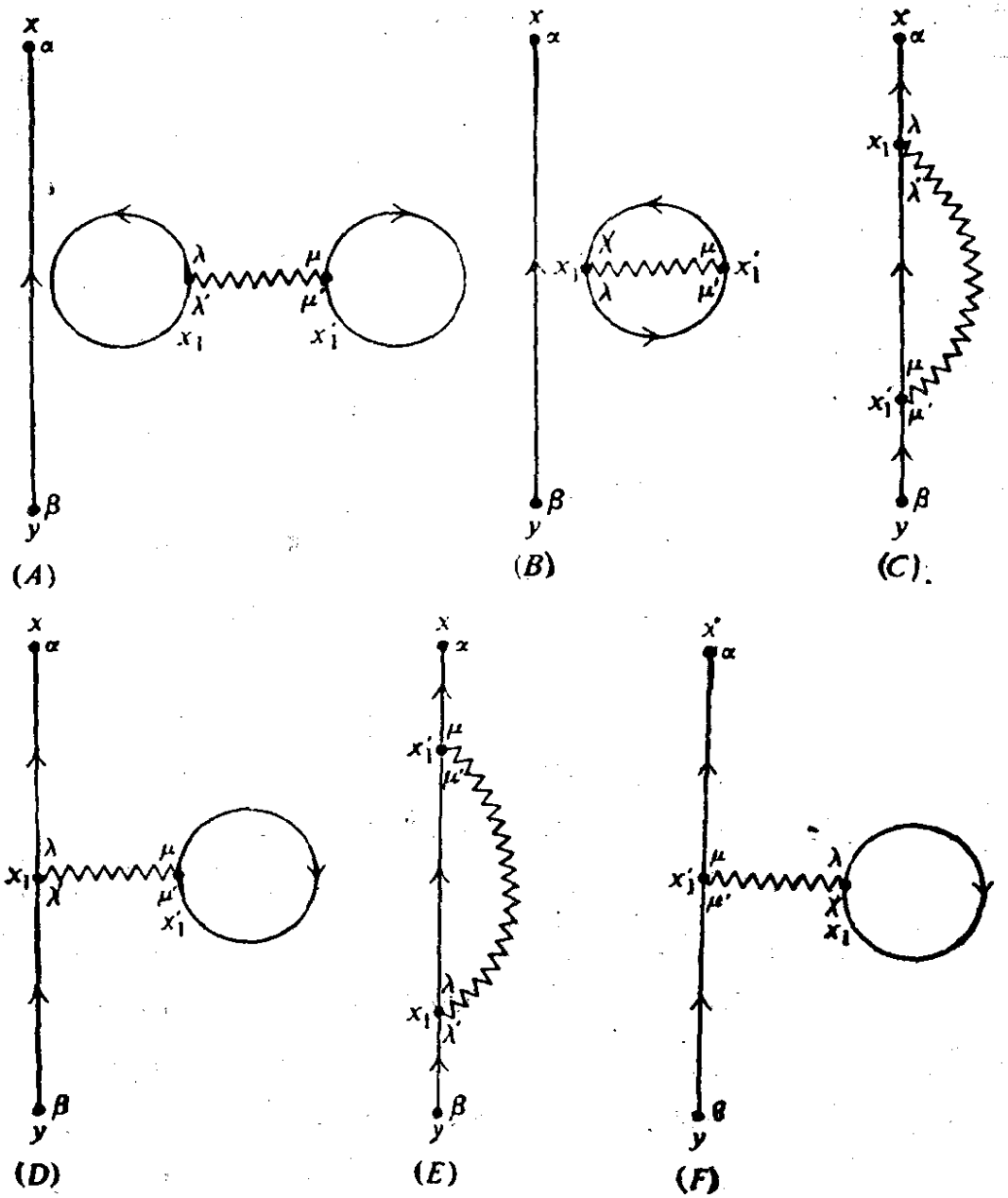


图 9.1 对 $\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y)$ 的第一级贡献.

1) R. P. Feynman, 前引文.

场论的精确关系首先由 Dyson 说明[1].

方程 (9.1) 的解析式和对应的图解 (图 9.1) 有几个有意思的特点.

1. 项 A、B、D 和 F 含有这样的 Green 函数，其两宗量是同时的，这由自我闭合的实线表示. 按照定义[方程 (7.41)]，表示式 $iG^0_{\alpha\beta}(x, x)$ 的意义是不清楚的，需要另行决定如何来解释它. 这个量表示 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^\dagger$ 的收缩，但对于相等的时刻，编时乘积没有定义. 然而，这种项来自相互作用哈密顿函数 $\hat{H}_1$ 中两个场算符的收缩，这两个场算符以 $\hat{\psi}^\dagger_\beta(x)\hat{\psi}_\alpha(x)$ 形式出现，即伴随场总出现在场的左边. 因此，对自旋为 s 的费米子系统，同时的 Green 函数必须解释为

$$\begin{aligned} iG^0_{\alpha\beta}(x, x) &= \lim_{t'\to t^+}\langle \Phi_0 | T[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}t)\hat{\psi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}t')]\Phi_0\rangle \\ &= -\langle \Phi_0 | \hat{\psi}^\dagger_\beta(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})|\Phi_0\rangle \\ &= -(2s+1)^{-1}\delta_{\alpha\beta}n^0(\mathbf{x}) \\ &= -\frac{\delta_{\alpha\beta}N}{(2s+1)V} \quad \text{(均匀系)}. \end{aligned} \tag{9.2}$$

这里 $n^0(\mathbf{x})$ 是未微扰基态的粒子密度[比较方程 (7.8)]，不一定与相互作用系统的 $n(\mathbf{x})$ 相等，因为相互作用可以使粒子重新分布. 不过，对于均匀系，$n^0 = n = N/V$，因为相互作用不改变总粒子数. 于是，项 D 和 F 表示与组成无相互作用基态(填满的 Fermi 海)的所有粒子的最低一级的直接相互作用，而项 C 和 E 提供了对应的最低一级的交换作用. 这里的术语“直接”和“交换”是从原来的反对称 Slater 行列式而来，如在方程(3.37) 下面所讨论过的.

2. 项 A 和 B 是不连接图形，它含有不与其余部分以任何线连接的子单元. 方程 (9.1) 表明这种项典型地具有其宗量

1) F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **75**: 486(1949); **75**: 1736(1949).

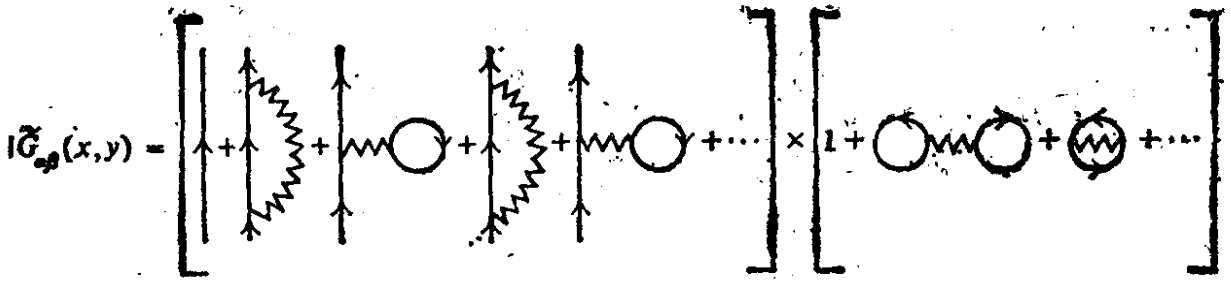


图 9.2　对 $\tilde{G}_{\alpha\beta}(x, y)$ 一级贡献的因式分解.

自我闭合的 Green 函数和相互作用. 其结果，这子单元的贡献可作为因子从 $\tilde{G}$ 的表示式中分解出来. 这样，在上面的项 A 和 B 中，$iG^0_{\alpha\beta}(x, y)$ 是一个因子，而积分是另一个因子. 在相互作用的第一级，我们断言方程 (8.11) 可按图 9.2 所示改写. 此图的每一个图解代表方程 (9.1) 中给出的一个有确定意义的积分. 图 9.2 的正确性是容易验证的，只要把乘积展开，并只保留第一级项，这些正是图 9.1 的各项. 此外的相互作用的第二级项在这里是不重要的，因为这里的计算只在相互作用的第一级中才是自洽的.

前面，我们一直没有考虑方程 (8.9) 中的分母

$$\langle \Phi_0 | \hat{S} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{U}(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle,$$

现在我们将在相互作用势的第一级中算出它. 算符 $\hat{U}(\infty, -\infty)$ 与方程 (8.9) 中的分子是一样的，除了算符 $\hat{\phi}_\alpha(x)\hat{\phi}^\dagger_\beta(y)$ 必须删去之外. 这样，分母也可用 Wick 定理计算，而且只有完全收缩的项有贡献. 计算结果显然给出图 9.3 中所示的项，其中每一个图解又是代表一个有确定意义的积分. 这些积分与方程 (9.1) 中项 A 和 B 里出现的积分精确地一样. 因此，我们得出结论方程 (8.9) 中的分母的贡献准确地抵消了分子中



图 9.3　$G_{\alpha\beta}(x, y)$ 的分母中的不连接图解.

的不连接图解的贡献. 至此，这个重要结果只是就相互作用的最低级验证，现在我们将对一切级证明它.[1]

不连接图解自我闭合；因而，它对 $G_{\alpha\beta}(x,y)$ 的贡献可以作为因子分解出来. 这样，方程(8.9)的分子中第 ν 级项可以写成

$$\begin{aligned} i\tilde{G}^{(\nu)}_{\alpha\beta}(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n+m}\delta_{\nu,m+n}\frac{1}{\nu!}\frac{\nu!}{n!m!} \\ \times\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_m \\ \times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_m)\hat{\phi}_\alpha(x)\hat{\phi}^\dagger_\beta(y)]|\Phi_0\rangle_{\text{连接}} \\ \times\int_{-\infty}^{\infty}dt_{m+1}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_\nu \\ \times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_{m+1})\cdots\hat{H}_1(t_\nu)]|\Phi_0\rangle, \qquad (9.3) \end{aligned}$$

应用 Wick 定理于这表示式的两边就可以看出此式. 包含 n 个积分的第二个因子一般是由许多不连接部份组成. 因子 $\nu!/n!m!$ 表示把 ν 个算符 $\hat{H}_1(t_i)$ 分成两组的方式数，如前所述，$\hat{H}_1$ 可在 T 乘积内移动而不带来附加的符号变化. 方程 (9.3) 现在必须对所有 ν 求和，这极易用 Kroneker δ 完成，方程(8.9) 的分子成为

$$\begin{aligned} i\tilde{G}_{\alpha\beta}(x,y) = \sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m\frac{1}{m!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_m \\ \times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_m)\hat{\phi}_\alpha(x)\hat{\phi}^\dagger_\beta(y)]|\Phi_0\rangle_{\text{连接}} \\ \times\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots \\ \times\int_{-\infty}^{\infty}dt_n\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle. \qquad (9.4) \end{aligned}$$

第一个因子是所有连接图解的和，而第二个因子则等同于分

1) 这里根据 A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, 和 I. E. Dzyaloshinski, 前引书，sec. 8 给出的证明.

母 $\langle\Phi_0|\hat{S}|\Phi_0\rangle$. 因而我们得到基本的公式

$$iG_{\alpha\beta}(x,y)=\sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m\frac{1}{m!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_m$$
$$\times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_1)\cdots$$
$$\times\hat{H}_1(t_m)\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^\dagger_\beta(y)]|\Phi_0\rangle_{\text{连接}}. \qquad (9.5)$$

这表示出把不连接图解作为因子分解出去. Brueckner 首先猜测了与此相关的关于基态能量的"连接集团"展开式[1]. 他验证了展开式直到相互作用势的第四级; 对一切级的证明则由 Goldstone[2] 用量子场论技术给出. 方程(9.5)是重要的,因为它使我们可以忽略一切那样的图解, 其中含有不与从 y 走向 x 的费米子线相连接的部份.

把 $G_{\alpha\beta}(x,y)$ 展开为连接图解,这完全等价于原来的微扰级数. 这些就是著名的 Feynman 图解,我们现在将推导把图解与微扰级数的项联系起来的精确的规则. 但是必须强调指出, Feynman 规则的详细结构, 取决于相互作用哈密顿函数 $\hat{H}_1$ 的形式, 而这里的推导只适用于通过二体势相互作用的全同粒子系统.

3. 对于任一给定图解, 就有来自一切类似图解的等同贡献, 这些图解仅仅是相互作用哈密顿函数 $\hat{H}_1$ 中的指标 $1\cdots m$ 的排列不同. 例如,图 9.4 的两个图解具有同样的数值,因为它们只是积分傀变量的标记法不同. 此外, 它们具有相同的符号, 因为 $\hat{H}_1$ 含有偶数个费米子场, 从而可在 T 乘积内随意移动. 在第 m 级,这种类型的可能交换有 $m!$ 种, 这对应于应用 Wick 定理时选择相互作用哈密顿函数 $\hat{H}_1$ 的 $m!$ 种方式. 所有这些项对 Green 函数给出同样的贡献,因此可以把每个图

---

1) K. A. Brueckner *Phys. Rev.*, **100**: 36 (1955 .

2) J. Goldstone *Proc. Roy. Soc.* (*London*), **A239**: 267 (1957).

解只算一次从而抵消方程(9.5)中的因子$(m!)^{-1}$. 注意这个结果只对连接图解才是正确的，这里外点x和y是固定的.

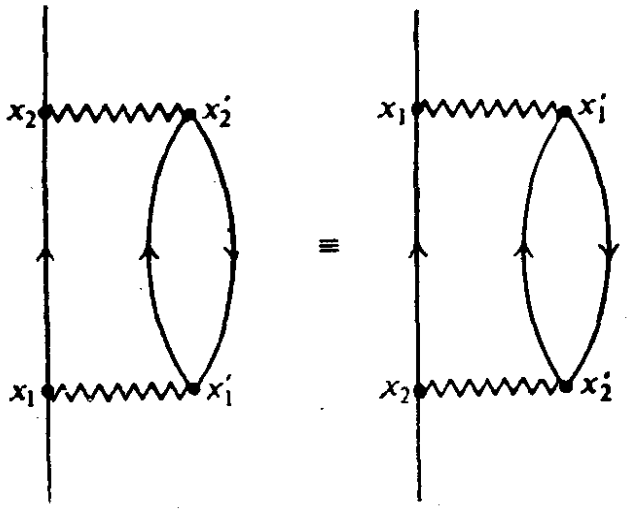


图 9.4 连接图解中的$\hat{H}_1$的典型置换.

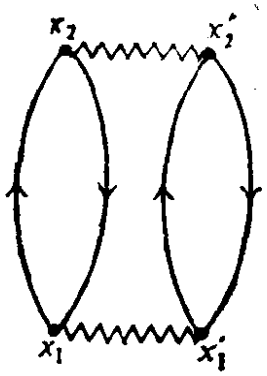
与此相反，图9.5所示的不连接图解仅仅代表单个项. 用Wick 定理展开$\langle \Phi_0|\hat{S}|\Phi_0\rangle$就容易看出这个结果. 把所有场算符收缩只有一种方式，交换$x_1x_1' \rightleftharpoons x_2x_2'$所得到的图解并不对应于新的、不同的解析项. 连接和不连接图解之间的这一差别是研究 Green 函数的基本理由之一；固定的外点大大简化了微扰论中的图解的计数.

因此我们求得单粒子 Green 函数$G_{\alpha\beta}(x, y)$的第n级贡献的下列规则:

(a) 画出具有n根相互作用线U和$2n+1$根有向 Green 函数G^0的所有拓扑不等价的连接图解.

这一步可由下列事实而简化，即费米子线或是自我闭合或是从y连续地走向x. 这些图解中的每一个都代表在变量集合$(x_1x_1')\cdots(x_nx_n')$中所有的$n!$个不同选择的可能性. 如果对拓扑不等价图解的精确意义有疑问的话，则 Wick 定理总可用来验证计数正确与否.

4. 在前述第一级例子中[方程(9.1)]，我们注意到项C



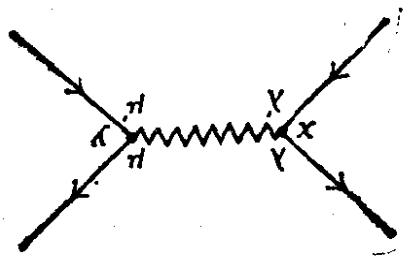


图 9.5　典型的不连接图解．　　图 9.6　$U(x, y)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}$ 的矩阵指标．

和项 E 相等，就像项 D 和项 E 相等那样；它们的差别只在于交换了 x 与 x'（以及相应的矩阵指标），而势在这个代换下是对称的[方程 (7.13)]．因此，每种类型的图解只要保留一个就够了．同时将方程(9.1)前面的因子 1/2 略去，它反映相互作用势中的 1/2 [方程 (2.4)][1]．于是我们得到其余的规则：

(b) 用四维时空点 x_i 标明每个顶点，

(c) 每根实线表示一个从 y 走向 x 的 Green 函数 $G^0_{\alpha\beta}(x, y)$，

(d) 每根波线表示相互作用

$$U(x, y)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} = V(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\delta(t_x - t_y),$$

这里矩阵指标的结合示于图 9.6，

(e) 把内变量对空间和时间积分．

5. 我们注意到在方程 (9.1) 中对 Green 函数和相互作用势的下标求和恰好是沿着费米子线的走向的矩阵积的形式．这样，我们叙述规则

(f) 沿每根连续的费米子线有一个自旋矩阵乘积，包括各个顶点处的势．

6. 出现在方程 (9.1) 中或图 9.1 中的图解的各个贡献的

---

1) 注意这结果又是只适用于连接图解，这在图 9.1 A 和 B 中是明显的．

总的符号如下决定. 每有一根费米子线自我闭合，这项就取得一个额外的负号. 这是可以看出的，只要注意到收缩成闭合环的场可按次序 $[\hat{\phi}^{\dagger}(1)\cdot\hat{\phi}(1)\cdot\cdot][\hat{\phi}^{\dagger}(2)\cdot\cdot\hat{\phi}(2)\cdot\cdot\cdot]\cdot\cdot\cdot[\hat{\phi}(N)\cdot]$ 排列而没有符号的变化. 为了把最后一个场算符移到它在左边的应有位置，现在需要费米子算符的奇数次交换. 这样我们得到规则

(g) 对每一项附加一个符号因子 $(-1)^F$，其中 F 是图解中闭合的费米子环的数目.

7. 方程 (9.5) 中第 n 级项有一个显示的数字因子 $(-i/\hbar)^n$，而场算符的 $2n+1$ 个收缩则贡献一个附加因子 $(i)^{2n+1}$ [见方程 (8.29)]. 因此我们得到规则

(h) 为计算 $G(x,y)$，对每个第 n 级项，指派一个因子 $(-i)(-i/\hbar)^n(i)^{2n+1}=(i/\hbar)^n$.

最后，早先对方程 (9.2) 的讨论给出规则

(i) 具有相同时间变量的 Green 函数必须解释为

$$G^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t^+)$$

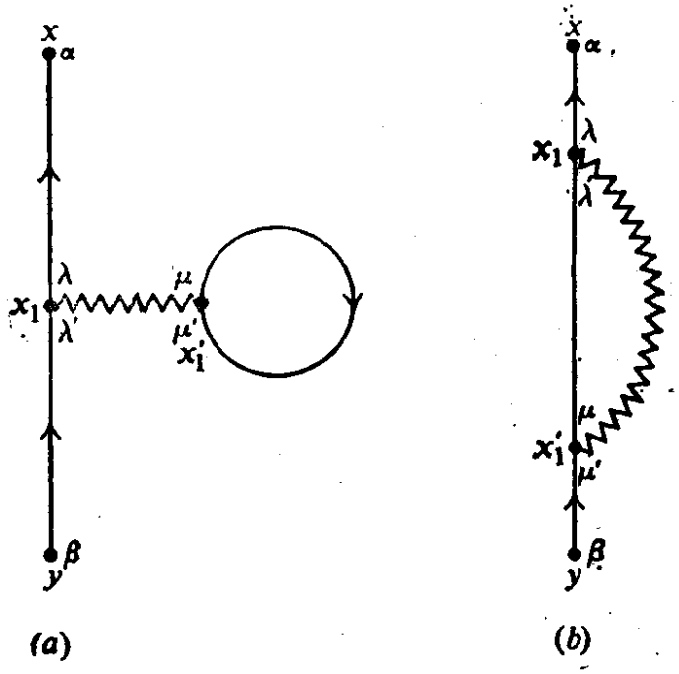


图 9.7 $G_{\alpha\beta}(x,y)$ 的所有一级 Feynman 图解.

上面的论述提供了唯一的规定以作出坐标空间中对 $G(x,y)$ 有贡献的一切 Feynman 图解. 每个图解对应于一个解析表示式,这个表示式现在可用 Feynman 规则写出. 这样, G的计算成为相当自动的过程.

作为 Feynman 规则的一个例子，我们现在写出图 9.7 所示的， $G_{\alpha\beta}(x,y)$ 的全部的第一级贡献，

$$
\begin{aligned}
G^{(1)}_{\alpha\beta}(x,y) = i\hbar^{-1}\int d^4x_1\int d^4x_1'\{&(-1)G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\\
&\times U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\beta}(x_1,y)\\
&\times G^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1') + G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\\
&\times U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda',\mu}(x_1,x_1')G^0_{\mu'\beta}(x_1',y).
\end{aligned}
\tag{9.6}
$$

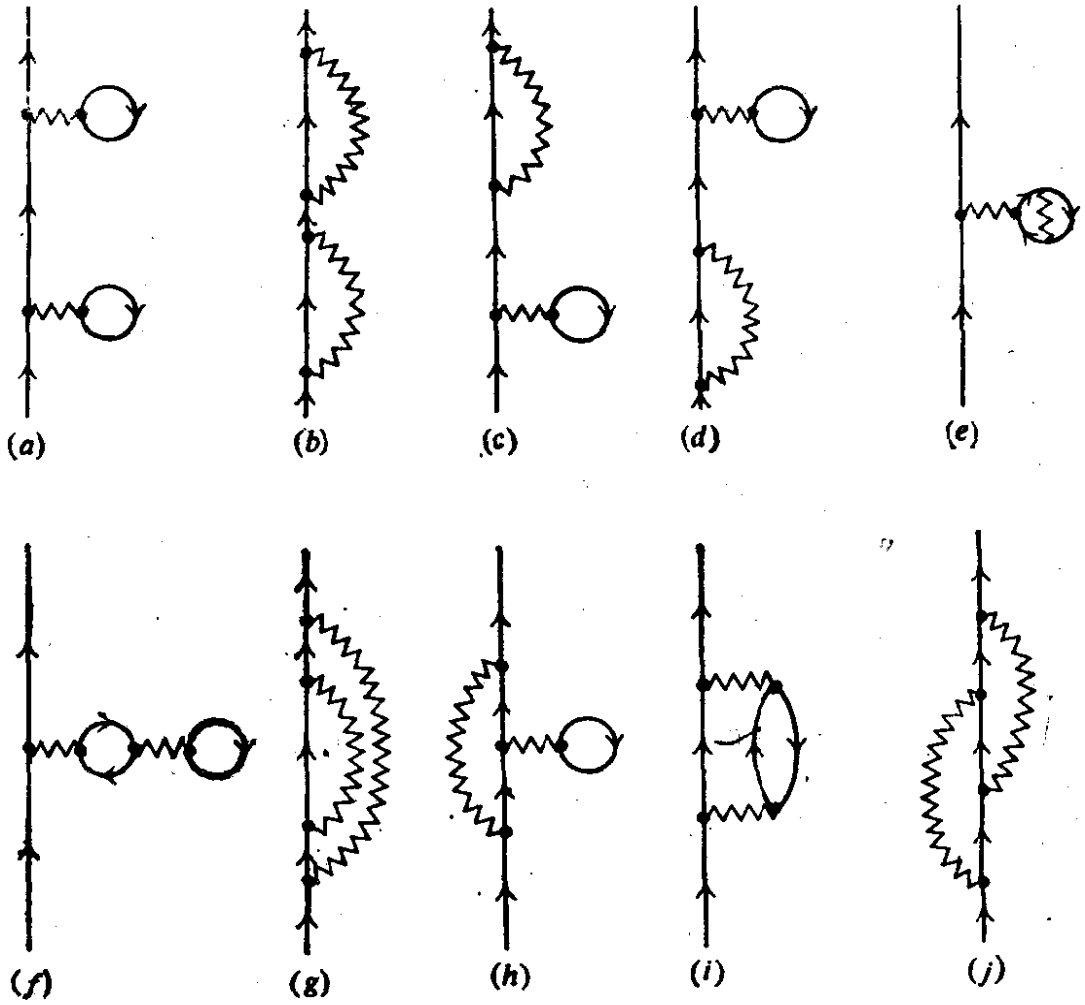


图 9.8 $G_{\alpha\beta}(x,y)$ 的所有第二级 Feynman 图.

这里以及今后，一切重复的自旋指标都是要求实施求和的. 相应的第二级贡献 $G^{(2)}(x, y)$ 需要较多的工作，我们在这里只断言有 19 个第二级 Feynman 图（图 9.8）. 读者务必自己验证，这些图解穷尽了这类第二级拓扑不同的连接图解，并且写下与各项相联系的解析表达式.

动量空间中的 Feynman 图解

原则上，Feynman 规则使我们可以写出准确的 Green 函数直到任意一级，但是这些项的实际计算导致一些很困难的问题. 因为每个无相互作用的 Green 函数 $G^0(x, y)$ 由两个拆开的部份所组成. 这样，就连第一级贡献[方程 (9.6)]也必须按时间变量的相对数值分成许多分离的部份. 反之，对时间的 Fourier 变换 $G^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega)$ 具有简单的形式，把这结合到计算中去将是方便的. 虽然可以考虑一种混合的表示 $G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega)$，它适用于具有不含时间的哈密顿函数的空间不均匀系统，但现在仍把讨论限于空间均匀且各向同性的系统，这时准确的 Green 函数取 $\delta_{\alpha\beta}G(x - y)$ 的形式. 于是空间的和时间的不变性允许全面的 Fourier 表示，我们写出

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = (2\pi)^{-4}\int d^4k e^{ik\cdot(x-y)} G_{\alpha\beta}(k), \qquad (9.7\,a)$$

$$G^0_{\alpha\beta}(x, y) = (2\pi)^{-4}\int d^4k e^{ik\cdot(x-y)} G^0_{\alpha\beta}(k), \qquad (9.7\,b)$$

其中已取了极限 $V \to \infty$. 这里引入了方便的四维记号

$$d^4k \equiv d^3k d\omega \qquad k \cdot x \equiv \mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t. \qquad (9.8)$$

此外，我们假定相互作用只依赖于坐标差

$$U(x, x') = V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t'). \qquad (9.9)$$

于是，它可以写为

$$U(x, x')_{\alpha\alpha',\beta\beta'} = (2\pi)^{-4}\int d^4k e^{ik\cdot(x-x')} U(k)_{\alpha\alpha',\beta\beta'}$$

$$= (2\pi)^{-3}\int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}V(\mathbf{k})_{\alpha\alpha',\beta\beta'}\delta(t-t'), \quad (9.10)$$

其中

$$U(k)_{\alpha\alpha',\beta\beta'} = V(\mathbf{k})_{\alpha\alpha',\beta\beta'} \quad (9.11\,a)$$

$$= \int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}V(\mathbf{x})_{\alpha\alpha',\beta\beta'} \quad (9.11\,b)$$

是粒子间的势的空间 Fourier 变换.

作为变换到动量空间的例子，考虑图 9.7 b 所示的图解，

$$\begin{aligned}G^{(16)}_{\alpha\beta}(x, y) &= i\hbar^{-1}\int d^4x_1 d^4x_1'(2\pi)^{-16}\int d^4k d^4p d^4p_1 d^4q \\ &\times G^0_{\alpha\lambda}(k)U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(p)G^0_{\mu'\beta}(p_1) \\ &\times e^{ik\cdot(x-x_1)}e^{iq\cdot(x_1-x_1')}e^{ip\cdot(x_1-x_1')}e^{ip_1\cdot(x_1'-y)} \\ &= i\hbar^{-1}(2\pi)^{-8}\int d^4k d^4p d^4p_1 d^4q G^0_{\alpha\lambda}(k)U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \\ &\times G^0_{\lambda'\mu}(p)G^0_{\mu'\beta}(p_1)e^{ik\cdot x}e^{-ip_1\cdot y}\delta^{(4)} \\ &\times (p+q-k)\delta^{(4)}(p_1-q-p) \\ &= (2\pi)^{-4}\int d^4k e^{ik\cdot(x-y)}[i\hbar^{-1}G^0_{\alpha\lambda}(k)(2\pi)^{-4}\int d^4p \\ &\times U(k-p)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(p)G^0_{\mu'\beta}(k)], \quad (9.12)\end{aligned}$$

其中四维 Dirac δ 函数具有通常的积分表示式

$$\delta^{(4)}(p) = (2\pi)^{-4}\int d^4x e^{ip\cdot x}.$$

注意方程 (9.12) 的确具有预期的形式，与方程 (9.7 a) 相比较就可认出方括号中的量是对 $G_{\alpha\beta}(k) \equiv G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega)$ 的相应贡献.

这个方法容易推广. 考虑图 9.9 所示的典型的内顶点. 按照方程 (9.10) 和 (9.7 b) 中的 Fourier 变换的定义，我们也可给相互作用 $U(x-x')$ 指派常规方向 $x' \to x$ [这个常规并不改变问题，因为势是对称的 $U(x-x')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} = U(x'-x)_{\mu\mu',\lambda\lambda'}$.] 现在坐标 x 只出现在平面波指数函数中，每根进线

有因子 $e^{\mp iq\cdot x}$，每根出线有因子 $e^{-iq\cdot x}$. 因而对 x 的积分给出

$$\int d^4x e^{i(q-q'+q'')\cdot x} = (2\pi)^4\delta^{(4)}(q - q' + q''), \qquad (9.13)$$

这使每个内顶点的能量与动量守恒. 剩下的唯一问题是端点，其典型结构示于图 9.10. 平移不变性保证 $q' = q''$，这可从方程(9.12)中看出，余下的因子 $e^{iq'\cdot(x-y)}$ 正是 $G_{\alpha\beta}(q')$ 的 Fourier 变换的定义所需要的.

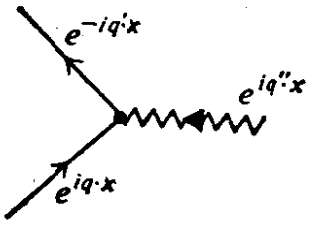


图 9.9 Feynman 图解中的典型内顶点.

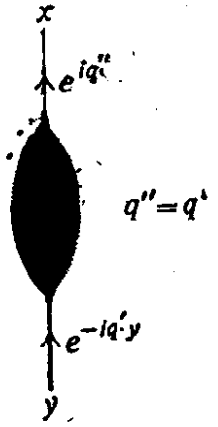


图 9.10 $G_{\alpha\beta}(x-y)$ 的 Feynman 图解的典型结构.

现在可以叙述对 $G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) \equiv G_{\alpha\beta}(k)$ 的第 n 级贡献的 Feynman 规则:

1. 画出具有 n 根相互作用线和 $2n + 1$ 根有向的 Green 函数的一切拓扑不同的连接图解.

2. 给每个相互作用线指派一个方向；将每根线与一个有向四维动量联系起来，四维动量在每个顶点守恒.

3. 每个 Green 函数对应于一个因子

$$G^0_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta}G^0(\mathbf{k}, \omega)$$
$$= \delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} - i\eta}\right]. \qquad (9.14)$$

4. 每个相互作用对应于因子 $U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} = V(\mathbf{q})_{\lambda\lambda',\mu\mu'}$，其矩阵指标与费米子线相联系，像图 9.11 中那样.

5. 沿着每个连续粒子线进行对自旋求和，包括各个顶点的势.

6. 对 n 个独立的内部四维动量积分.

7. 附加一个因子 $(i/\hbar)^n(2\pi)^{-4n}(-1)^F$，其中 F 是闭合费米子环的数目.

8. 任一个形成闭合环的单粒子线如图 9.11 a 中的，或是任一个由同一相互作用线连接的单粒子线如图 9.11 b 中的，都解释为 $e^{i\omega\eta}G_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega)$，这里要在计算的末尾令 $\eta\to 0^+$.

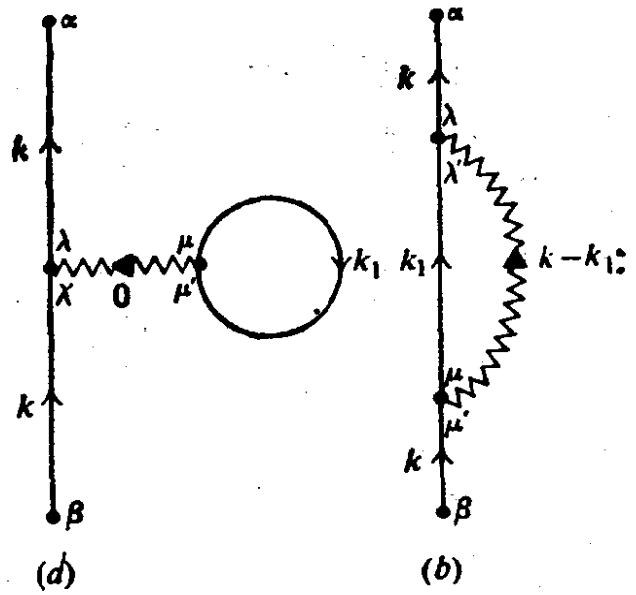


图 9.11　$G_{\alpha\beta}(k)$ 的所有第一级 Feynman 图解.

作为动量空间中 Feynman 规则的例子，我们计算图 9.11 所示第一级贡献 $G^{(1)}_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega)$. 虽然拓扑结构等同于坐标空间中的相应图解（图 9.7），标记和解释自然大不相同. 在图 9.11 a 中，与相互作用相联系的四维矢量为零，这是由于在每一端点的守恒要求. 直截了当的辨认给出

$$G^{(1)}_{\alpha\beta}(k)=i\hbar^{-1}(-1)(2\pi)^{-4}\int d^4k_1 G^0_{\alpha\lambda}(k)U(0)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\beta}(k)$$
$$\times G^0_{\mu'\mu}(k_1)e^{i\omega_1\eta}+i\hbar^{-1}(2\pi)^{-4}$$

$$\times \int d^4k_1 G^0_{\alpha\lambda}(k) U(k-k_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}$$
$$\times G^0_{\lambda'\mu}(k_1) G^0_{\mu'\beta}(k) e^{i\omega_1\eta}$$
$$= i\hbar^{-1} G^0(k) \Big\{ (2\pi)^{-4} \int d^4k_1 [-U(0)_{\alpha\beta,\mu\mu} G^0(k_1) e^{i\omega_1\eta}$$
$$+ U(k-k_1)_{\alpha\mu,\mu\beta} G^0(k_1) e^{i\omega_1\eta}] \Big\} G^0(k), \qquad (9.15)$$

这里对自旋求和的过程已利用每个因子 G^0 中的 Kronecker δ 加以简化. 此处,以及今后,我们采用如下约定

$$U(0) \equiv U(\mathbf{k}=0), \qquad (9.16\,a)$$
$$V(0) \equiv V(\mathbf{k}=0). \qquad (9.16\,b)$$

为了再向前进一步,我们考虑自旋为 1/2 的粒子,而相互作用势有两种不同的可能.

1. 假如相互作用与自旋无关,则它在自旋空间中具有形式 $\mathbf{1}(1)\mathbf{1}(2)$,就是说,对于两个粒子都是单位自旋矩阵:

$$U(q)_{\alpha\beta,\lambda\mu} = U(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\lambda\mu}. \qquad (9.17)$$

矩阵元就成为

$$U_{\alpha\beta,\mu\mu} = 2U\delta_{\alpha\beta} \qquad U_{\alpha\mu,\mu\beta} = U\delta_{\alpha\beta}. \qquad (9.18)$$

2. 如果相互作用与自旋有关,其形式为 $\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\boldsymbol{\sigma}(2)$,则

$$U(q)_{\alpha\beta,\lambda\mu} = U(q)\boldsymbol{\sigma}(1)_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}(2)_{\lambda\mu}, \qquad (9.19)$$

而有关的量是

$$\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\mu\mu} = 0 \qquad \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\mu}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\mu\beta} = [(\boldsymbol{\sigma})^2]_{\alpha\beta} = 3\delta_{\alpha\beta}. \qquad (9.20)$$

这些结果是由 $\mathrm{tr}\boldsymbol{\sigma} = 0$ 和 $\mathrm{tr}\,\mathbf{1} = 2$ 的事实得到的. 对于形式为

$$V(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2) = V_0(|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|)\mathbf{1}(1)\mathbf{1}(2)$$
$$+ V_1(|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|)\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\boldsymbol{\sigma}(2) \qquad (9.21)$$

的相互作用,方程 (9.15) 到 (9.20) 表明 $G^{(1)}$ 确实是对矩阵指标对角的:

$$G^{(1)}_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G^{(1)}$$

准确的 Green 函数总是可以写成形式

$$G(k) = G^0(k) + G^0(k)\Sigma(k)G^0(k), \qquad (9.22)$$

这定义了自能 $\Sigma(k)$. 第一项正是零级贡献，而第二项的结构是从图 9.10 的结构来的. 同样的结构也出现于方程(9.15)中，从而说明第一级自能为

$$\hbar\Sigma^{(1)}(k) = i(2\pi)^{-4}\int d^4k_1[-2V_0(0) + V_0(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1) + 3V_1(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)]G^0(k_1)e^{i\omega_1\eta}. \qquad (9.23)$$

频率积分现在可以用方程 (9.14) 完成，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_1}{2\pi}e^{i\omega_1\eta}\left[\frac{\theta(|\mathbf{k}_1|-k_F)}{\omega_1-\omega_{\mathbf{k}_1}+i\eta}+\frac{\theta(k_F-|\mathbf{k}_1|)}{\omega_1-\omega_{\mathbf{k}_1}-i\eta}\right] = i\theta(k_F-|\mathbf{k}_1|),$$

这里收敛因子要求在上半平面把迴路闭合. 于是，方程 (9.23) 第一项中的动量积分给出粒子密度 $n = N/V$ [比较方程 (3.27)]，我们求得

$$\hbar\Sigma^{(1)}(k) \equiv \hbar\Sigma^{(1)}(\mathbf{k}) = nV_0(0) - (2\pi)^{-3}\int d^3k'[V_0(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + 3V_1(\mathbf{k}-\mathbf{k}')]\theta(k_F-k'). \qquad (9.24)$$

注意第一级自能与频率无关. 方程(9.24)中出现的两项具有下列物理解释. 第一项代表被介质中粒子朝前散射的 Born 近似(图 9.11 a)，而第二项代表与介质中粒子的交换散射，这也是在 Born 近似下. (图 9.11 b).

Dyson 方程[1]

现在我们将把任意的 Feynman 图解中的各种贡献进行

1) F. J. Dyson，前引文. (顶点部份的讨论和 Dyson 方程的完全集合在本书第十二章讨论)

分类. 这个步骤给出 Dyson 方程，它以一种特别紧凑的形式概括了 Feynman-Dyson 微扰论.

1. 自能插入图形：图解分析使下面这一点变清楚了：准确的 Green 函数等于无微扰的 Green 函数加上在每一端点各有一自由 Green 函数的一切连接项. 这种结构示于图 9.12 中，粗线表示 G，细线表示 G^0. 相应的解析表示式由下式给出

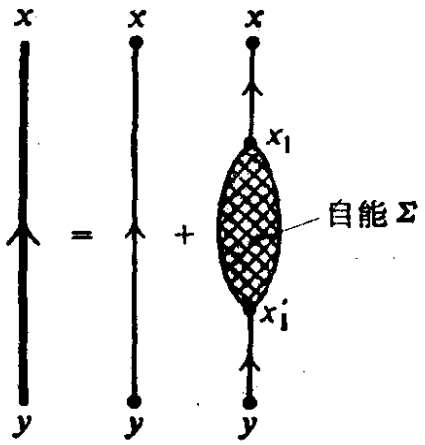


图 9.12 $G_{\alpha\beta}(x, y)$ 的一般结构.

$$G_{\alpha\beta}(x,y) = G^0_{\alpha\beta}(x,y) + \int d^4x_1 \int d^4x_1' G^0_{\alpha\lambda}(x, x_1) \times \Sigma(x_1, x_1')_{\lambda\mu} G^0_{\mu\beta}(x_1', y), \qquad (9.25)$$

这就定义了自能 $\Sigma(x_1, x_1')_{\lambda\mu}$. 自能插入图形定义为图解中任一部份，它与其余部份通过二根粒子线相连(一根进，一根出).

我们接着引入正规自能插入图形的概念，这种自能插入图形不能通过割断单根粒子线而分成两部分. 例如，图 9.8a，9.8b，9.8c 和 9.8d 都含有非正规自能插入图形，图 9.8 的其余各项只含有正规自能插入图形. 按定义，正规自能是所有正规自能插入图形之和，记作 $\Sigma^*(x_1, x_1')_{\alpha\beta}$. 从这些定义得出：自能是由正规自能一切可能的重复之和所组成.

$$\Sigma(x_1, x_1') = \Sigma^*(x_1, x_1') + \int d^4x_2 d^4x_2' \Sigma^*(x_1, x_2) G^0(x_2, x_2')$$

$$\times \Sigma^{\star}(x_2', x_1') + \int d^4x_2 d^4x_2' \int d^4x_3 d^4x_3' \Sigma^{\star}(x_1, x_2)$$
$$\times G^0(x_2', x_2') \Sigma^{\star}(x_2', x_3) G^0(x_3, x_3')$$
$$\times \Sigma^{\star}(x_3', x_1') + \cdots. \qquad (9.26)$$

这里就旋量指标而言，每个量都是矩阵，因而略去了指标．方

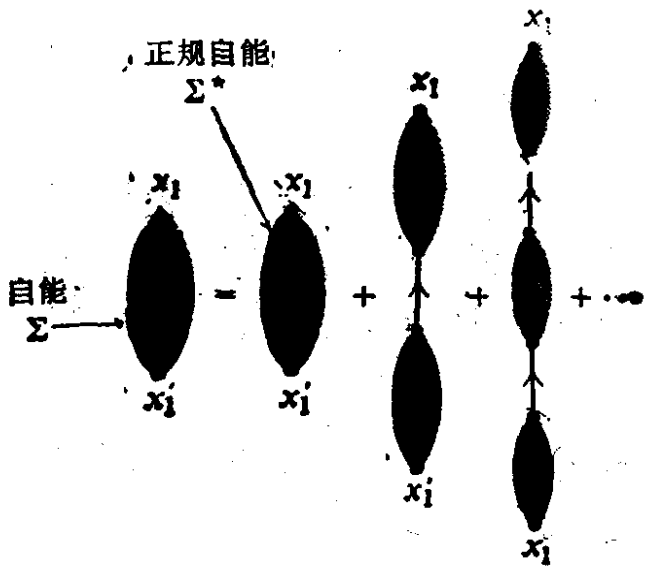


图 9.13　自能 Σ 与正规自能 $\Sigma^{\star}$ 之间的关系

程 (9.26) 的结构示于图 9.13．相应地，单粒子 Green 函数[方程 (9.25)] 成为 (图 9.14)

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4x_1 d^4x_1' G^0(x, x_1) \Sigma^{\star}(x_1, x_1') G^0(x_1', y)$$
$$+ \int d^4x_1 d^4x_1' \int d^4x_2 d^4x_2' G^0(x, x_1) \Sigma^{\star}(x_1, x_1')$$
$$\times G^0(x_1', x_2) \Sigma^{\star}(x_2, x_2') G^0(x_2', y) + \cdots, \qquad (9.27)$$

它可以在形式上求和而给出准确 G 的积分方程 (Dyson 方程)

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = G^0_{\alpha\beta}(x, y) + \int d^4x_1 d^4x_1' G^0_{\alpha\lambda}(x, x_1)$$
$$\times \Sigma^{\star}(x_1, x_1')_{\lambda\mu} G_{\mu\beta}(x_1', y). \qquad (9.28)$$

方程 (9.28) 的正确性可以通过上式右边的迭代来验证，这迭代逐项地重现方程 (9.27).

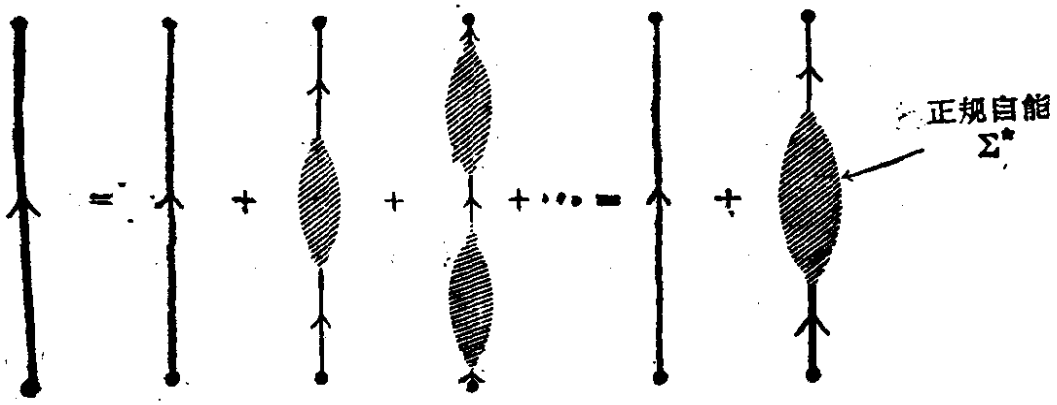


图 9.14 $G_{\alpha\beta}(x, y)$ 的 Dyson 方程

如果相互作用在平移下不变，系统是空间均匀的，Dyson 方程自然变为简单得多. 在这情况下，方程 (9.27) 中出现的量只取决于坐标差，因而可以引入这些差的四维 Fourier 变换. 用定义

$$\sum^{\star}(x, y)_{\alpha\beta} = (2\pi)^{-4}\int d^4k\, e^{ik\cdot(x-y)}\sum^{\star}(k)_{\alpha\beta} \qquad (9.29)$$

和方程 (9.7)，容易算出方程 (9.28) 中的空间时间积分，而得出动量空间中的代数方程[比较方程 (9.22)]

$$G_{\alpha\beta}(k) = G^0_{\alpha\beta}(k) + G^0_{\alpha\lambda}(k)\sum^{\star}(k)_{\lambda\mu}G_{\mu\beta}(k). \qquad (9.30)$$

在通常情况下，G、G^0、和 $\sum^{\star}$ 对矩阵指标都是对角的，于是 Dyson 方程可显示地解出，

$$G(k) = \frac{1}{[G^0(k)]^{-1} - \sum^{\star}(k)}. \qquad (9.31)$$

G^0 的倒数由下式给出

$$[G^0(k)]^{-1} \equiv [G^0(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} = \omega - \omega_{\mathbf{k}} \equiv \omega - \hbar^{-1}\varepsilon^0_{\mathbf{k}}, \qquad (9.32)$$

因为在方程 (9.14) 中的 $\pm i\eta$ 现在不重要了；我们求得

$$G_{\alpha\beta}(k) \equiv G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$$

$$= \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}\varepsilon^0_{\mathbf{k}} - \sum^{\star}(\mathbf{k}, \omega)}\,\delta_{\alpha\beta}. \qquad (9.33)$$

在一般的情况，这个表示式必须用一个逆矩阵代替，这逆矩阵

是矩阵方程(9.30)的解. 如第7节所表明,准确的 Green 函数 $G(\mathbf{k},\omega)$ 作为 ω 的函数,它的奇点既决定系统的激发能 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 又决定其衰减 $\gamma_{\mathbf{k}}$. 此外, Lehmann 表示保证了对于实的 ω,

$$\begin{cases} \mathrm{Im}\Sigma^{*}(\mathbf{k},\omega) \geqslant 0 & (\omega < \mu/\hbar), \\ \mathrm{Im}\Sigma^{*}(\mathbf{k},\omega) \leqslant 0 & (\omega > \mu/\hbar), \end{cases} \tag{9.34}$$

因此化学势可作为 $\mathrm{Im}\Sigma^{*}(\mathbf{k},\omega)$ 的变号点而定出.

作为这种分析的一个例子,我们将考虑图9.7和图9.8所示全部第一级和第二级图解. 显然,两个第一级项都是正规自能插入图形. 其结果是,第一级正规自能 $\Sigma^{*}_{(1)}$,由图9.15中的图解给出. 在端点的小箭头指明怎样与Green函数连接,这些图解既可以在坐标空间中也可以在动量空间中来解释. 在第二级,情况显著地复杂些. 特别是,图 9.8 a 到 9.8 d 的图解表示 $\Sigma^{*}_{(1)}$ 所有可能的第二级迭代,因而对应于非正规自能插入图形. 另一方面,其余的项(图 9.8 e 到 j)都包含正规自能插入图形,现在我们把对 $\Sigma^{*}_{(2)}$ 的全部贡献展示于图 9.16.

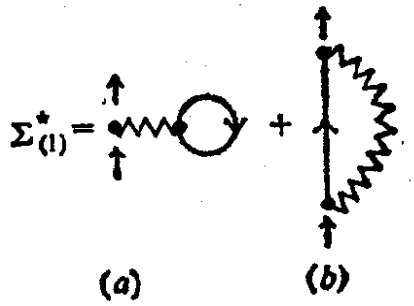


图 9.15 第一级正规自能 $\Sigma^{*}_{(1)}$.

一个特别简单的近似是在 Dyson 方程的解 (9.33) 中写 $\Sigma^{*}(\mathbf{k},\omega) \approx \Sigma^{*}_{(1)}(\mathbf{k},\omega) = \Sigma^{*}_{(1)}(\mathbf{k})$ [见方程(9.24)]. 这个近似对应于一类无穷多的图解求和,这些图解包含 $\Sigma^{*}_{(1)}$ 的任意迭代(图 9.17). 近似 Green 函数的极点出现在能量

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(1)}_{\mathbf{k}} &= \varepsilon^{0}_{\mathbf{k}} + \hbar\Sigma^{*}_{(1)}(\mathbf{k}) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + nV(0) - (2\pi)^{-3}\int d^3k' \\ &\quad \times [V_0(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + 3V_1(\mathbf{k}-\mathbf{k}')]\theta(k_F - k'), \end{aligned} \tag{9.35}$$

这式决定了包含一个附加粒子而动量为 $\hbar\mathbf{k}$ 的态的能量 $\varepsilon^{(1)}_{\mathbf{k}}$.

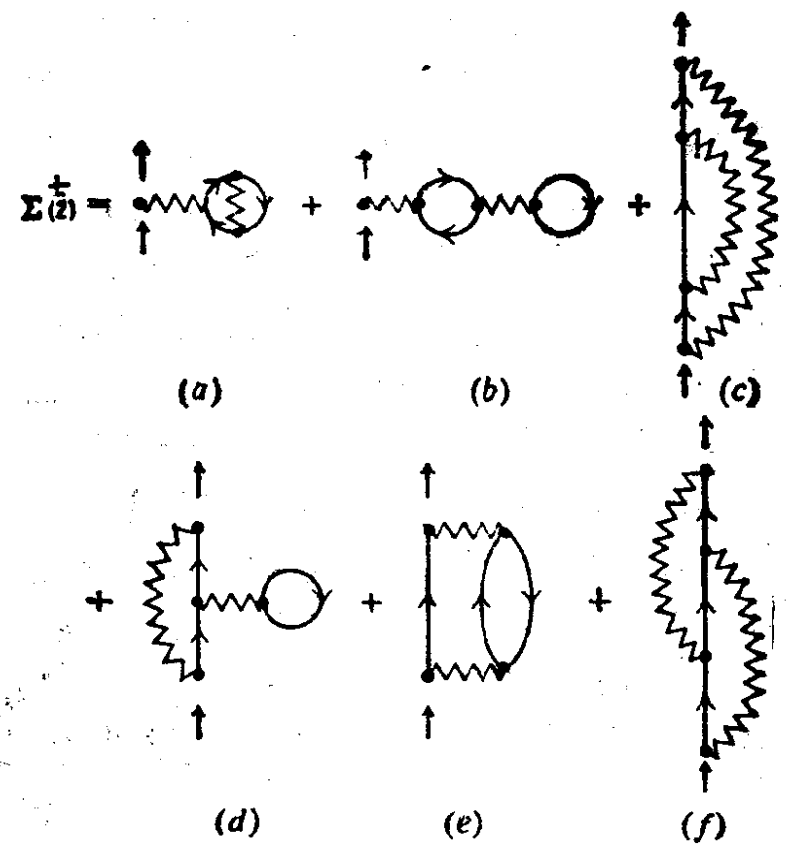


图 9.16　第二级正规自能 $\Sigma^{\star}_{(2)}$.

这里 $nV(0)$ 是常数的能量移动;它来自图 9.15 a 的"蝌蚪形"图解，并代表离开所有其它粒子的向前散射. 积分项与 $\mathbf{k}$ 有关,它来自图 9.15 b. 在现在(第一级)的近似下，正规自能是实的，因而系统无衰减地永远传播下去. 这个例子清楚地说

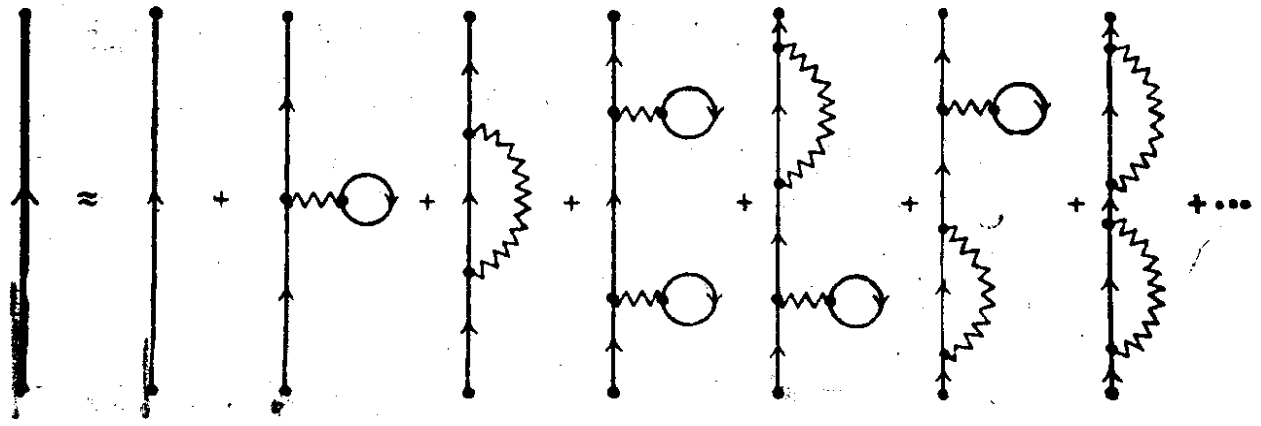


图 9.17　用代换 $\Sigma^{\star}\approx\Sigma^{\star}_{(1)}$ 得到的近似的 G.

明了 Dyson 方程的力量，因为对 $\Sigma^{\star}$ 的任一近似都引出 Green 函数的一个无穷级的近似级数. 这样，Dyson 方程使我们可用紧凑的形式求出一类无穷多个微扰项的和.

G 的显式解 [方程 (9.33)]，使我们可以将均匀系统的基态能量 [方程 (7.27) 和 (7.32)] 改写成特别简单的形式. 就自旋为 s 的费米子考虑方程 (7.27)，$\Sigma^{\star}$ 和 G 对于矩阵指标是对角的. 与方程 (9.33) 相结合给出

$$\begin{aligned} E &= -iV(2s+1)\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta} \frac{1}{2}\hbar \\ &\quad \times \left[\frac{\hbar\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}^0}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \hbar\Sigma^{\star}(\mathbf{k},\omega)}\right] \\ &= -iV(2s+1)(2\pi)^{-4}\int d^4k e^{i\omega\eta} \\ &\quad \times \left\{\left[\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + \frac{1}{2}\hbar\Sigma^{\star}(\mathbf{k},\omega)\right] G(\mathbf{k},\omega) + \frac{1}{2}\hbar\right\} \\ &= -iV(2s+1)(2\pi)^{-4}\int d^4k e^{i\omega\eta} \\ &\quad \times \left[\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + \frac{1}{2}\hbar\Sigma^{\star}(\mathbf{k},\omega)\right] G(\mathbf{k},\omega), \end{aligned} \tag{9.36}$$

这里最后一行是由下列极限过程得到的，

$$\begin{aligned} \lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta} &\equiv \lim_{\eta\to 0^+}\left[\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\epsilon|\omega|}e^{i\omega\eta}\frac{d\omega}{2\pi}\right] \\ &= \lim_{\eta\to 0^+}\left[\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{\eta^2+\epsilon^2}\right] = 0. \end{aligned} \tag{9.37}$$

将方程(9.36)应用于无相互作用的 Fermi 系统容易验证这极限过程是正确的. 按同样的方式，方程 (7.32) 可改写为

$$\begin{aligned} E - E_0 = -\frac{1}{2}iV(2s+1)\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{i\omega\eta}\hbar \\ \times\left[\frac{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^0}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \hbar\Sigma^{\star\lambda}(\mathbf{k},\omega)}\right] \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{2}iV(2s+1)(2\pi)^{-4}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}$$

$$\times \int d^4k e^{i\omega\eta\hbar}\sum{}^{\star\lambda}(\mathbf{k},\omega)G^{\lambda}(\mathbf{k},\omega), \qquad (9.38)$$

其中 $\sum^{\star\lambda}$ 和 G^{λ} 二者都必须就 0 和 1 之间的一切 λ 值算出.

2. 极化插入图形：对两粒子之间的相互作用也可进行类似的分析，这相互作用总是由最低级的相互作用加上一系列带有进和出的最低级相互作用线的连接图解所组成（图 9.18）. 我们显然可写出准确的相互作用的积分方程；这个积

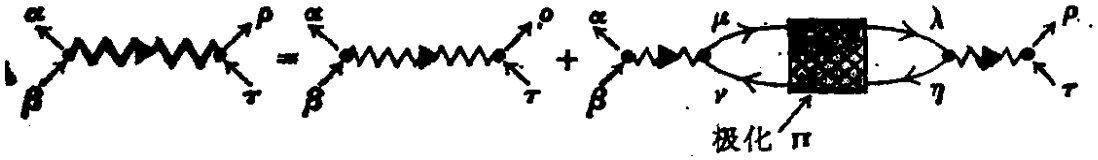


图 9.18　有效相互作用 $U_{\alpha\beta,\rho\tau}$ 的一般结构.

分方程对均匀系统又变为较简单，均匀系统可以在动量空间中研究. 如果 $U(q)_{\alpha\beta,\rho\tau}$ 和 $U_0(q)_{\alpha\beta,\rho\tau}$ 分别表示准确的和最低级的相互作用，则相应的方程取如下形式

$$U(q)_{\alpha\beta,\rho\tau} = U_0(q)_{\alpha\beta,\rho\tau} + U_0(q)_{\alpha\beta,\mu\nu} \times \Pi_{\mu\nu,\eta\lambda}(q)U_0(q)_{\eta\lambda,\rho\tau}, \qquad (9.39)$$

这定义了极化插入部份 $\Pi_{\mu\nu,\eta\lambda}(q)$. 引入正规极化 $\Pi^{\star}$ 的概念也是方便的，它是这样的极化部份，它不能用割断单根相互作用线而分成两个极化部分（图 9.19）. 于是，方程 (9.39)

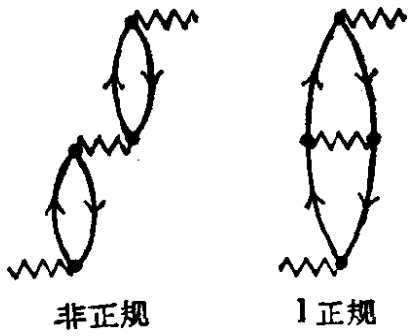


图 9.19　典型的非正规和正规极化插入图形.

可改写为准确的相互作用和正规极化之间的方程(图 9.20). 对均匀系统,这方程成为代数方程

$$U(q)_{\alpha\beta,\rho\tau} = U_0(q)_{\alpha\beta,\rho\tau} + U_0(q)_{\alpha\beta,\mu\nu} \times \Pi^{\star}_{\mu\nu,\eta\lambda}(q)U(q)_{\eta\lambda,\rho\tau}. \tag{9.40}$$

一般地说，方程 (9.39) 和 (9.40) 具有复杂的矩阵结构，我们通常只考虑与自旋无关的势

$$U_0(q)_{\alpha\beta,\rho\tau} = U_0(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\rho\tau}. \tag{9.41}$$

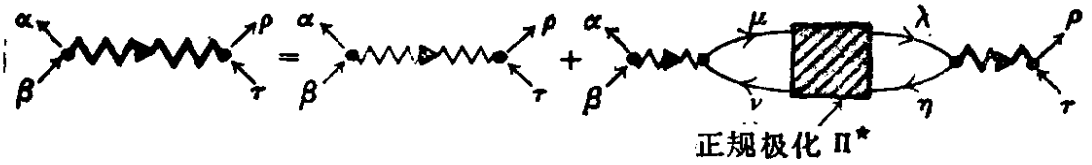


图 9.20 $U_{\alpha\beta,\rho\tau}$ 的 Dyson 方程.

于是,准确的相互作用紧跟着具有同样的结构

$$U(q)_{\alpha\beta,\rho\tau} = U(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\rho\tau}, \tag{9.42}$$

这里函数 $U(q)$ 由下列较简单的方程确定,

$$U(q) = U_0(q) + U_0(q)\Pi(q)U_0(q), \tag{9.43 a}$$

$$U(q) = U_0(q) + U_0(q)\Pi^{\star}(q)U(q). \tag{9.43 b}$$

这里引入了缩写

$$\Pi(q) \equiv \Pi_{\alpha\alpha,\lambda\lambda}(q), \tag{9.44 a}$$

$$\Pi^{\star}(q) \equiv \Pi^{\star}_{\alpha\alpha,\lambda\lambda}(q), \tag{9.44 b}$$

而方程 (9.43*b*) 的直接求解给出

$$U(q) = \frac{U_0(q)}{1 - \Pi^{\star}(q)U_0(q)}. \tag{9.45}$$

这个结果可用来定义广义的介电函数 $\kappa(q)$,

$$U(q) = \frac{U_0(q)}{\kappa(q)}, \tag{9.46}$$

它表征了介质的极化对最低级相互作用的修改. 比较方程 (9.45) 和 (9.46) 给出

$$\kappa(q) = 1 - U_0(q)\Pi^*(q). \tag{9.47}$$

Goldstone 定理

量子场论应用于多体问题是 Goldstone 在 1957 年开创的[1]. 他证明了不连接图解的抵消直到一切级，并且推导了基态能量移动的如下表示式

$$E - E_0 = \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0} \hat{H}_1 \right)^n | \Phi_0 \rangle_{\text{连接}}, \tag{9.48}$$

这里 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{H}_1$ 是 Schrödinger 表象中的不含时间的算符. 这个结果可以通过在各个相互作用 $\hat{H}_1$ 之间插进 $\hat{H}_0$ 的本征态的完全集合来解释. 分母中的 $\hat{H}_0$ 就可代之以相应的本征值. 在方程 (9.48) 中，凡从基态 $|\Phi_0\rangle$ 开始而又结束于基态 $|\Phi_0\rangle$ 的所有矩阵元都包括在内. 我们可以用下列方式想象出这些矩阵元的意义：算符 $\hat{H}_1$ 作用在态 $|\Phi_0\rangle$ 上产生两个粒子和两个空穴. 于是这个态以 $(E_0 - \hat{H}_1)^{-1}$ 传播，而下一个 $\hat{H}_1$ 于是可以产生更多的粒子和空穴或使已存在的粒子或空穴散射. 由此得到的中间态又以 $(E_0 - \hat{H}_1)^{-1}$ 传播，如此继续下去. 最后一个 $\hat{H}_1$ 则必须使系统回到基态 $|\Phi_0\rangle$. 一个典型过程可以

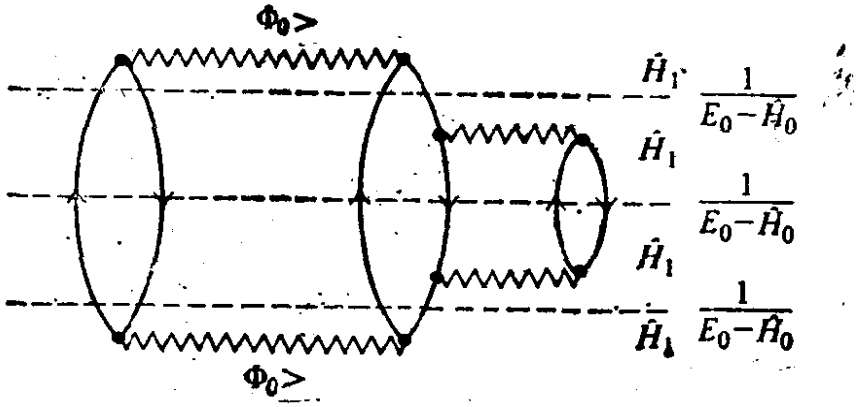


图 9.21 $E - E_0$ 的展开式中的典型 Goldstone 图解.

1) J. Goldstone，前引文.

图示于图 9.21，其中向上走的箭头表示有一个粒子，向下走的箭头表示有一个空穴，而水平的波线表示一个 $\hat{H}_1$ 的作用。这样，事件的序列从图解的底部开始而向上进行．这些图解称为 Goldstone 图解，并且这些图只是保持对于计算方程 (9.48) 有贡献的一切矩阵元的踪迹．下标“连接”的意思是只包括那些与最后一个相互作用相连接的图解．特别是，既没有粒子又没有空穴的态 $|\Phi_0\rangle$，决不能作为中间态出现于方程 (9.45) 中，因为否则所得到的矩阵元必然由不连接部分组成．

Goldstone 定理 (9.48) 是基态能量的不含时间微扰的常见表示式的另一准确说法(直到一切级)．头几项的等价性是容易验证的，只要在每个相互作用 $\hat{H}_1$ 之间插入 $\hat{H}_0$ 本征态的完全集合．

$$E - E_0 = \langle\Phi_0|\hat{H}_1|\Phi_0\rangle + \sum_{n\neq 0} \frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_1|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\hat{H}_1|\Phi_0\rangle}{E_0 - E_n} + \cdots. \quad (9.49)$$

均匀介质的相应的 Goldstone 图解(见习题 3.13)示于图 9.22．头两个图解表示 $\langle\Phi_0|\hat{H}_1|\Phi_0\rangle$ 中的通常的直接和交换的贡献．

对均匀系统应用 Goldstone 定理时，我们看到，因为 $\hat{H}_1$ 中的矩阵元都有一个遍及整个空间的积分，所以在每个相互作用中动量守恒．此外，中间态中的粒子具有确确实实的未微扰能量 $\epsilon^0_{\mathbf{q}}$，这 $\epsilon^0_{\mathbf{q}}$ 是与中间态粒子的动量 $\mathbf{q}$ 相关的，而中间态是虚的这性质概括在能量分母中．与此相反，Green 函数的 Feynman-Dyson 微扰论（从它也能计算 $E-E_0$）使能量和动量两者在每个顶点都守恒，但中间态粒子可用与 $\mathbf{q}$ 无关的任意频率传播．由于这个原故，Feynman-Dyson 方法具有明显的协变性，这个优点在任何相对论的理论中是至关紧要的．尽管如此，这两种手段只不过是微扰展开式中各项的两种不

同编组方法和解释方法，而一切物理结果必然是等同的.

我们现在证明 Goldstone 定理[方程 (9.48)]. 如果相互

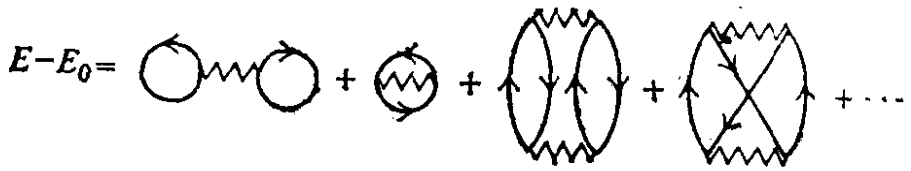


图 9.22 均匀系统中 $E-E_0$ 的所有第一级和第二级的 Goldstone 图解.

作用系统的基态是从无相互作用系统绝热地得来，则 Gell-Mann 和 Low 定理[方程 (6.45)] 把基态能量移动表示为

$$E-E_0=\frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_1\hat{U}(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}. \tag{9.50}$$

分子可写为

$$\begin{aligned}&\langle\Phi_0|\hat{H}_1\hat{U}(0,-\infty)|\Phi_0\rangle\\&=\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_\nu\\&\quad\times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_\nu)]|\Phi_0\rangle\end{aligned} \tag{9.51}$$

从而计算出来. 这里出现在左边的因子 $\hat{H}_1$ 已归并到 T 乘积内，因为 $\hat{H}_1\equiv\hat{H}_1(0)$ 对应的时间，比被积函数中所有其它乘子都迟. 应用 Wick 定理来计算方程 (9.51) 中对矩阵元有贡献的所有收缩. 因子 $\hat{H}_1(0)$ 提供一个固定的外点，它使我们能够区分连接和不连接的图解；连接图解必须收缩于 $\hat{H}_1(0)$. 这个差别示于图 9.23. 假设有 n 个连接的 $\hat{H}_1$ 和 m 个不连接的 $\hat{H}_1$，而 $\nu=n+m$；这样的划分有 $\nu!/n!m!$ 种方法. 因此方程 (9.51) 中的对 ν 求和可改写成

$$\begin{aligned}&\sum_n\sum_m\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n+m}\frac{\nu!}{n!m!}\frac{1}{\nu!}\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_n\\&\quad\times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle_C\\&\quad\times\int_{-\infty}^{0}dt_{n+1}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_{n+m}\\&\quad\times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_{n+1})\cdots\hat{H}_1(t_{n+m})]|\Phi_0\rangle,\end{aligned} \tag{9.52}$$

就象在方程(9.4)中一样.(为简单起见,现用下标C表示连接的.)对m的求和重现方程(9.50)的分母,这样,我们得到

$$E-E_0=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_n$$
$$\times\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle_C, \qquad (9.53)$$

这说明了式中不连接图解的抵消.

现在我们着手完成方程(9.53)中的时间积分.考虑第n级贡献,并以来自方程(6.5)的$\hat{H}_1(t)$与$\hat{H}_1$的关系式代入,

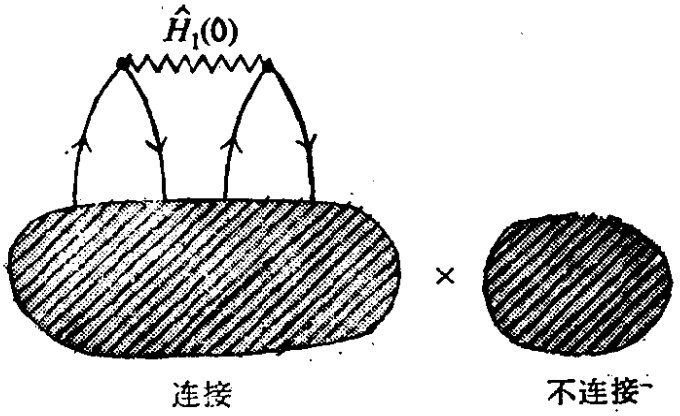


图 9.23 典型的连接和不连接的 Goldstone 图解.

$$[E-E_0]^{(n)}=\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{0}dt_1\int_{-\infty}^{t_1}dt_2\cdots\int_{-\infty}^{t_{n-1}}$$
$$\times\, dt_n e^{\epsilon(t_1+t_2+\cdots+t_n)}\langle\Phi_0|\hat{H}_1 e^{i\hat{H}_0t_1/\hbar}$$
$$\times\,\hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0t_1/\hbar}e^{i\hat{H}_0t_2/\hbar}\hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0t_2/\hbar}\cdots$$
$$\times\,\hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0t_{n-1}/\hbar}e^{i\hat{H}_0t_n/\hbar}\hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0t_n/\hbar}|\Phi_0\rangle_C.$$

这里我们注意到所有$n!$可能的时间顺序作出等同的贡献(见第6节),因而在这个矩阵元中只对算符的一个特定的时间顺序进行计算.绝热衰减因子也恢复起来.把变量改为相对时间

$$\begin{aligned}
x_1&=t_1,\\
x_2&=t_2-t_1,\\
x_3&=t_3-t_2,\\
&\vdots\\
x_n&=t_n-t_{n-1},
\end{aligned}
\qquad \text{或} \qquad
\begin{aligned}
t_1&=x_1,\\
t_2&=x_2+x_1,\\
t_3&=x_3+x_2+x_1\\
&\vdots\\
t_n&=x_n+x_{n-1}+\cdots+x_1,
\end{aligned}$$

并利用

$$\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = E_0|\Phi_0\rangle.$$

这个变换给出

$$[E - E_0]^{(n)} = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \langle\Phi_0|\hat{H}_1\int_{-\infty}^{0} e^{n\varepsilon x_1}e^{i(\hat{H}_0-E_0)x_1/\hbar}dx_1\hat{H}_1$$
$$\times \int_{-\infty}^{0} e^{(n-1)\varepsilon x_2}e^{i(\hat{H}_0-E_0)x_2/\hbar}dx_2\hat{H}_1\cdots$$
$$\times \int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon x_n}e^{i(\hat{H}_0-E_0)x_n/\hbar}dx_n\hat{H}_1|\Phi_0\rangle_C.$$

积分现在全都可以完成，我们求得

$$[E - E_0]^{(n)} = \langle\Phi_0|\hat{H}_1\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\varepsilon n\hbar}\hat{H}_1$$
$$\times \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\varepsilon(n-1)\hbar}\hat{H}_1\cdots$$
$$\times \hat{H}_1\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\varepsilon\hbar}\hat{H}_1|\Phi_0\rangle_C.$$

这个结果立即给出 Goldstone 定理，即方程 (9.48)，因为限于连接图解就保证$|\Phi_0\rangle$不能作为中间态出现，而且态$|\Phi_0\rangle$是非简并的. 由此，$E_0 - \hat{H}_0 + i\varepsilon\hbar$ 决不会等于零，因而收敛因子 $+i\varepsilon$ 成为无关紧要的，我们可使用传播函数 $[E_0 - \hat{H}_0]^{-1}$，就像在方程 (9.48) 中那样.

还可以使这形式证明更具体化，只要考虑对方程 (9.53) 有贡献的一切第 n 级 Feynman 图解就行. 各个图解由未微扰 Green 函数 G^0 所组成，它显然包含粒子和空穴两者的传播[比较方程 (7.41)]. 这些图解可编组为各含有 $n!$ 个等价图解的集合，这些等价图解的差别仅在于时间变量的排列. 又由于被积函数是对称的，可以作代换

$$\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_n = \int_{-\infty}^{0}dt_1\int_{-\infty}^{t_1}dt_2\cdots\int_{-\infty}^{t_{n-1}}dt_n.$$

选取一个特定的时间顺序，$n!$ 个图解中的每一个现在代表一种不同的过程. 于是，遍及相对时间 ($0 \geqslant x_i \geqslant -\infty$) 的积

分给出 $n!$ 个不同的 Goldstone 图解，它们对应于原来的 Feynman 图解中的 $n!$ 个可能的时间顺序。这样，一切可能时序的连接 Feynman 图解的集合给出连接的 Goldstone 图解的完全集合。Feynman-Dyson 方法和 Goldstone 方法在微扰论的每一级是明显地等价的，但是 Feynman-Dyson 分析有一个基本的优点即把不含时间微扰论的许多项合并为单个的 Feynman 图解。我们可以注意到类似的分析适用于任意的 Heisenberg 场算符的基态期待值，例如，单粒子 Green 函数 $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega)$，它是方程 (9.5) 的 Fourier 变换。如果把遍及一切时间的积分显示地完成，则所得的微扰展开式可按中间态分类，就像在图 9.21 中那样。按这方式，我们可得到一个给定的 Feynman 图解和一组 Goldstone 图解(或不含时间微扰论的图解)之间的唯一对应关系。

Goldstone 定理 (9.48) 最初是由 Brueckner 关于强相互作用 Fermi 系统理论促成的。这个 Brueckner-Goldstone 技巧已构成关于核物质，[1] He^3，[2] 和原子[3] 的基态性质的大量工作的基础。

---

1) K. A. Brueckner, C. A. Leyinson, and H. M. Mahmoud, *Phys. Rev.*, **95**: 217 (1954); H. A. Bethe, *Phys. Rev*, **103**: 1353 (1956); K. A. Brueckner and J. L. Gammel *Phys. Rev.* **109**: 1023 (1958); K. A. Brueckner, Theory of Nuclear Structure, C. DeWitt (ed.), "Many-Body Problem", p47, John Wiley and Sons, Inc., New York 1959; H. A. Bathe, B. H. Brandow, and A. G. Petschek, *Phys. Rev.* **129**: 225 (1963); 也见本书第十一章.

2) K. A.Brueckner and J. L. Gammel, *Phys. Rev.* **109**: 1040 (1958); T. W. Burkhardt, *Ann. Phys.* (*N. Y.*) **47**: 516 (1968); E. Østgaard, *Phys. Rev.* **170**: 257 (1968)

3) 参阅，例如，H. P. Kelly, "Correlation Structure in Atomes," K. A. Brueckner (ed.), Advances in Theoretical Physics, Vol. 2, p75, Academic Press Inc., New York, 1968. 这个题目的评述也由 "Correlation Effects in Atoms and Molecules," 给出，R. Lefebvre and C. Moser (ed.) "Advances in Chemical Physics" Vol. XIV, Interscience Publishers, New York, 1969.

习　　题

3.1　试证明当 $t < t_0$ 时，$\hat{U}(t, t_0)$ 的积分方程可以写为

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_t^{t_0} dt' \hat{H}_1(t')\hat{U}(t', t_0).$$

由此证明

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_t^{t_0} dt_1 \cdots \times \int_t^{t_0} dt_n \tilde{T}[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)],$$

这里 $\tilde{T}$ 表示反编时(最迟的时间在右边). 从方程 (6.16) 和 (6.23) 导出这个结果.

3.2　量子场论中最有用的关系式之一是

$$e^{i\hat{S}}\hat{O}e^{-i\hat{S}} = \hat{O} + i[\hat{S}, \hat{O}] + \frac{i^2}{2!}[\hat{S}, [\hat{S}, 0]] + \frac{i^2}{3!}[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, 0]]] + \cdots.$$

验证这个结果直到已写出的那一级. 算出这些对易式，并且将级数重新求和，以从方程 (6.7) 和 (6.9) 导出方程 (6.10).

3.3　定义两粒子格林函数

$$G_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{x}_1 t_1, \mathbf{x}_2 t_2; \mathbf{x}_1' t_1', \mathbf{x}_2' t_2') = (-i)^2\langle\Psi_0|T[\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}_1 t_1)\hat{\phi}_\beta(\mathbf{x}_2 t_2)\phi_\delta^\dagger(\mathbf{x}_2' t_2)\phi_\gamma^\dagger(\mathbf{x}_1' t_1')]|\Psi_0\rangle / \langle\Psi_0|\Psi_0\rangle.$$

试证明两体相互作用在准确的基态中的期待值由下式给出

$$\langle\hat{V}\rangle = -\frac{1}{2}\int d^3x \int d^3x' V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{\mu'\lambda',\mu\lambda} \times G_{\lambda\lambda';\mu\mu'}(\mathbf{x}' t, \mathbf{x} t; \mathbf{x}' t^\dagger, \mathbf{x} t^\dagger).$$

3.4　考虑有外势 $U(\mathbf{x})$ 存在时的多体系统，系统具有与

自旋无关的相互作用势 $V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$. 试证明准确的单粒子格林函数遵守运动方程

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m}-U(\mathbf{x}_1)\right]G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1t_1,\mathbf{x}_1't_1')$$

$$\mp i\int d^3x_2V(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)G_{\alpha\gamma;\beta\gamma}(\mathbf{x}_1t_1,\mathbf{x}_2t_2;\mathbf{x}_1't_1',\mathbf{x}_2t_1^+)$$

$$=\hbar\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1')\delta(t_1-t_1')\delta_{\alpha\beta},$$

这里上面(下面)的符号属于玻色子(费米子),而两粒子 Green 函数定义在习题 3.3 中.

3.5 对理想 Fermi 气体,用方程 (3.29) 和 (3.30) 验证方程 (7.58),并证明 $\mu=\epsilon_F^0$.

3.6 考虑函数

$$F_\alpha(z)=\frac{2}{\pi\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n^2+z^2/\alpha^2}$$

并讨论它在复 z 平面上的解析结构.

(a) 证明这级数可以求和而给出 $F_\alpha(z)=z^{-\frac{1}{2}}\coth(\pi z^{\frac{1}{2}}/\alpha)+(\alpha/\pi z)$,它具有相同的解析结构.

(b) 考察极限 $\alpha\to 0$ 并与方程 (7.67) 的讨论相比较.

3.7 (a) 如 $\int_{-\infty}^{\infty}dx|\rho(x)|<\infty$,试证明,对于 $\mathrm{Im}z\neq 0$,$f(z)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}dx\rho(x)(z-x)^{-1}$ 有界且是解析的.证明只要 $\rho(x)\neq 0$,则 $f(z)$ 在实轴两边不连续,因而 $f(z)$ 在这区域中有一根割线.

(b) 假设如下简单形式的 $\rho(x)=\gamma(\gamma^2+x^2)^{-1}$,试就 $\mathrm{Im}z>0$ 算出 $f(z)$ 并求出它向 $\mathrm{Im}z<0$ 的解析延拓.

(c) 对 $\mathrm{Im}z<0$ 重复部分 (b)。加以比较并讨论.

3.8 试推导 $D(\mathbf{k},\omega)$ 的 Lehmann 表示,$D(\mathbf{k},\omega)$ 是

$$iD(x,y)\equiv\frac{\langle\Psi_0|T[\tilde{n}_H(x)\tilde{n}_H(y)]|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}$$

的 Fourier 变换，其中密度涨落算符定义为

$$\tilde{n}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\phi}_a^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_a(\mathbf{x}) - \frac{\langle\Psi_0|\hat{\phi}_a^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_a(\mathbf{x})|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}.$$

证明 $D(\mathbf{k}, \omega)$ 是在复 ω 平面的半纯函数，极点在第二和第四象限中. 引入相应的推迟和超前函数，并作出它们的 Fourier 变换的 Lehmann 表示. 讨论其解析性质并推导类似于方程 (7.70) 的色散关系.

3.9 试就费米子作出变换到粒子和空穴的正则变换 $c_{\mathbf{k}\lambda} = \theta(k - k_F)a_{\mathbf{k}\lambda} + \theta(k_F - k)b^\dagger_{-\mathbf{k}\lambda}$. 应用 Wick 定理证明关系式

$$\begin{aligned} c_1^\dagger c_2^\dagger c_4 c_3 = {} & N(c_1^\dagger c_2^\dagger c_4^\dagger c_3) + \theta(k_F - k_2) \\ & \times [\delta_{24}N(c_1^\dagger c_3) - \delta_{23}N(c_1^\dagger c_4)] \\ & + \theta(k_F - k_1)[\delta_{13}N(c_2^\dagger c_4) - \delta_{14}N(c_2^\dagger c_3)] \\ & + \theta(k_F - k_1)\theta(k_F - k_2) \\ & \times [\delta_{13}\delta_{24} - \delta_{14}\delta_{23}], \end{aligned}$$

右边的正规乘积现在属于新的粒子和空穴算符，而下标表示量子数 $(\mathbf{k}, \lambda)$.

3.10 显示地验证不连接图解的抵消 [方程 (8.11)，(9.3)，和方程 (9.4)] 直到相互作用势的第二级.

3.11 考虑无相互作用的自旋为 1/2 的费米子系统处于外加静态势中，这外加势的哈密顿函数为

$$\hat{H}^{\mathrm{ex}} = \int d^3x \hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})V_{\alpha\beta}(\mathbf{x})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{x})$$

(a) 用 Wick 定理求出存在外势时单粒子 Green 函数的 Feynmann 规则.

(b) 证明 Dyson 方程成为

$$\begin{aligned} G^{\mathrm{ex}}_{\alpha\beta}(x, y) = {} & G^0_{\alpha\beta}(x - y) \\ & + \hbar^{-1}\int d^3z G^0_{\alpha\lambda}(x - z)V_{\lambda\lambda'}(\mathbf{z})G^{\mathrm{ex}}_{\lambda'\beta}(z, y). \end{aligned}$$

(c) 用类似于方程 (7.23) 和 (7.31) 的形式表示出基态能量. 如粒子间又有相互作用,将发生什么?

3.12 考虑自旋为 1/2 的费米子均匀系,其相互作用与自旋无关.

(a) 用动量空间中的 Feynman 规则写出对正规自能的二级贡献;并算出频率积分(其中有些为零).

(b) 从而证明对基态能量的二级贡献可以写为

$$\frac{E^{(2)}}{V} = 2m\hbar^{-2}\int\cdots\int(2\pi)^{-9}d^3k d^3p d^3l d^3n\,\delta^{(3)}(\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{l}-\mathbf{n})$$
$$\times[2V(\mathbf{l}-\mathbf{k})^2 - V(\mathbf{l}-\mathbf{k})V(\mathbf{p}-\mathbf{l})]$$
$$\times\theta(k_F-p)\theta(k_F-k)\theta(n-k_F)\theta(l-k_F)$$
$$\times(p^2+k^2-l^2-n^2+i\eta)^{-1}.$$

(c) 具体考虑电子气体,重新推导习题 1.4 的结果.

3.13 试从 Goldstone 定理 (9.48) 推导习题 3.12 所给出的 $E^{(2)}$ 的表示式. 从这个结果,给出图 9.22 所示 Goldstone 图解的计算规则.

3.14 试用方程 (9.33) 证明长寿的单粒子激发的能量 ε_k 和阻尼 $|\gamma_k|$ 由下式给出

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^0 + \mathrm{Re}\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon_k/\hbar),$$
$$\gamma_k = \left[1 - \frac{\partial \mathrm{Re}\Sigma^*(\mathbf{k},\omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\varepsilon_k/\hbar}\right]^{-1}\mathrm{Im}\Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon_k/\hbar).$$

3.15 考虑自旋 1/2 的费米子的均匀系统,具有方程 (9.21) 的与自旋有关的相互作用势,假设 $\Pi^*_{\mu\nu,\kappa\lambda}(q)$ 可以用 $\frac{1}{2}\Pi^0(q)\delta_{\nu\kappa}\delta_{\lambda\mu}$ 来近似.

(a) 解方程 (9.40) 以求得

$$U(q)_{\alpha\beta,\rho\tau} = \frac{V_0(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\rho\tau}}{1-V_0(q)\Pi^0(q)} + \frac{V_1(q)\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\rho\tau}}{1-V_1(q)\Pi^0(q)}.$$

(b) 把方程 (9.39) 和方程 (9.40) 结合以得出用 Π^* 和 U_0 表示 Π 的 Dyson 方程. 用上述关于 Π^* 的近似解出这个方程并证明

$$\Pi_{\mu\nu,\eta\lambda}(q) = \frac{1}{2}\Pi^0(q)\delta_{\nu\eta}\delta_{\lambda\mu} + \frac{1}{2}\Pi^0(q)U(q)_{\nu\mu,\lambda\eta} \times \frac{1}{2}\Pi^0(q),$$

其中 $U(q)$ 取自 (a).

第四章　费米系统

原则上，第三章所发展的微扰论和 Feynman 图解使我们能够计算 Green 函数直到相互作用势的一切级．但是，这样的步骤是不现实的，我们必须求助于某种近似的方法来代替．例如，最简单的近似在正规自能中只保留第一级贡献 $\Sigma^{\star}_{(1)}$，如在方程 (9.24) 和 (9.35) 中所讨论过的．不幸，对于大多数有关系统，这种近似是不够的，必须把某些类型的高级项包括进来．有两种方法特别成功；二者都包括了微扰论中的无穷多级，但是，除此以外它们就很不一样了．在第一个方法中，对正规自能插入图形中一小部分重新作了解释，粒子线表示准确的 Green 函数 G，而不是无相互作用的 Green 函数 G^0．因此，这些近似是自洽的，因为 G 既决定正规自能 $\Sigma^{\star}$ 而又被正规自能 $\Sigma^{\star}$ 所决定．与此不同，第二个方法是保留一类挑选过的（无穷多个）用 G^0 表示的正规自能插入图形．多粒子哈密顿函数的细节决定哪一方法适合，我们将考虑三个例子以说明怎样作出这样的选择．这三个例子是：（自洽的）Hartree-Fock 近似（第 10 节）；适用于排斥的刚性核势的梯形图解的求和（第 11 节）；适用于长程库仑势的环形图解求和（第 12 节）．

10. Hartree-Fock 近似

关于相互作用量子力学系集的讨论的出发点是，哈密顿函数 $\hat{H}_0$ 的基态 $|\Phi_0\rangle$，

$$\hat{H}_0 = \sum_k \hbar\omega_k c_k^\dagger c_k.$$

在$|\Phi_0\rangle$中，N个粒子中的每一个各占据一个确定的单粒子态，因此它的运动与其它粒子的存在无关．这个情况明显地将被粒子间相互作用修改；尽管如此，实验事实是，对于许多不同的系统，例如，金属、原子和核子，这种单粒子描述方法是一个非常好的近似．因此，一个自然的方法就是保留单粒子图象，而认为各个粒子是在一个单粒子势中运动，这个势来自这个粒子与所有其它粒子的平均相互作用．于是，这个单粒子能量应该是未微扰能量加上对所有其它粒子占据的态进行了平均的相互作用势能．这就是在方程 (9.35) 中得到的结果；这样，作为第一级近似，我们可以只保留对正规自能的第一级贡献 $\Sigma^*_{(1)}$．相应的 Feynman 图解示于图 10.1．但是，这样的计

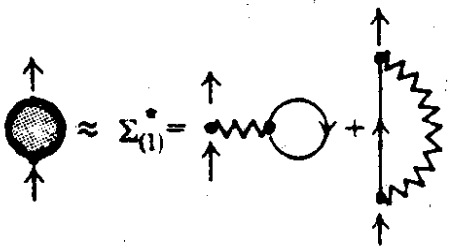


图 10.1　最低级正规自能．

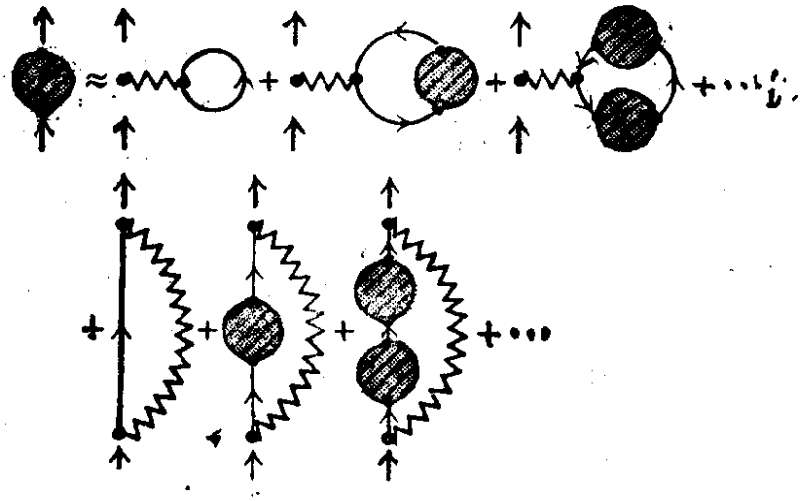


图 10.2　在 Hartree-Fock 近似下的正规自能的级数．

算不是完全自洽的，因为这里把对 Σ^*_{HF} 作出贡献的背景粒子是当作无相互作用来处理的．而实际上这些粒子当然也在所有其它粒子平均势场中运动．这样，应当包括的不仅是图 10.1 所示的两个自能项，而是图 10.2 所示的所有图解．打阴影线的圆圈仍表示正规自能；它是我们想要计算的量．既然准确的 Green 函数可表示为包含正规自能的级数［方程 (9.27)］，图 10.2 中的所有自能项可用图 10.3 所示的一对图解求和，在那里粗线表示准确的 G，这 G 自身又如图 10.4 所示由正规自能所确定．我们着手细致地考察这些方程．

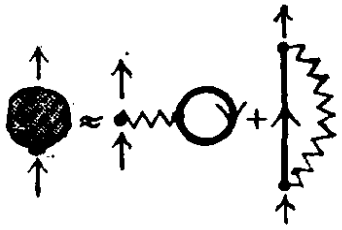


图 10.3 在 Hartree-Fock 近似下的自洽正规自能．

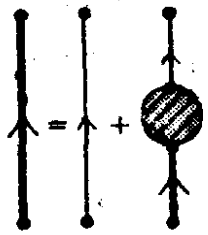


图 10.4 G 的 Dyson 方程．

考虑处于静态的且与自旋无关的外势场 $U(\mathbf{x})$ 中的系统，例如，金属或原子中的电子，外势场破坏了空间均匀性．于是，总的哈密顿函数成为

$$\hat{H}_0 = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x})\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x})\right]\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \qquad (10.1\,a)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' \hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \times \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \qquad (10.1\,b)$$

这里为简单起见，认为粒子间相互作用势与自旋无关

$$V(\mathbf{x},\mathbf{x}')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} = V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}. \qquad (10.2)$$

在这种近似下，Dyson 方程取图 10.5 所示的形式，图中细线表示 G^0（对应于 $\hat{H}_0$ 的无相互作用 Green 函数），而粗线表示自洽的 G．相应的解析方程由下式给出

$$G(x,y)=G^0(x,y)+\int d^4x_1d^4x_1'G^0(x,x_1)\times\Sigma^*(x_1,x_1')G(x_1',y),\tag{10.3}$$

这里矩阵指标的 Kronecker δ 已作为因子分解出来. 完全像第三章那样，Feynman 规则给出正规自能的显式

$$\hbar\Sigma^*(x_1,x_1')=-i\delta(t_1-t_1')\Big[\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1')(2s+1)\int d^3x_2\times G(\mathbf{x}_2t_2,\mathbf{x}_2t_2^+)V(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)-V(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1')G(\mathbf{x}_1t_1,\mathbf{x}_1't_1^+)\Big],\tag{10.4}$$

这式对自旋为 s 的费米子是成立的. 注意第一项比第二项多出额外的因子$(2s+1)$; 这来自自旋求和[比较方程 (9.18)].

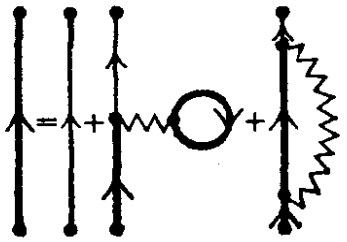


图 10.5 在 Hartree-Fock 近似下的G 的 Dyson 方程.

在现在这个例子中，$\hat{H}$ 和 $\hat{H}_0$ 两者都不含时间，因此用 Fourier 表示是方便的，

$$G(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=(2\pi)^{-1}\int d\omega e^{-i\omega(t-t')}G(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega),\tag{10.5 a}$$

$$G^0(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=(2\pi)^{-1}\int d\omega e^{-i\omega(t-t')}G^0(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega),\tag{10.5 b}$$

$$\Sigma^*(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')=\Sigma^*(\mathbf{x},\mathbf{x}')\delta(t-t')=(2\pi)^{-1}\int d\omega e^{-i\omega(t-t')}\Sigma^*(\mathbf{x},\mathbf{x}').\tag{10.5 c}$$

就像在第一级近似中[方程 (9.24)]，这里正规自能也与频率无关. 方程 (10.3) 中的时间积分现在可以完成，我们求得

$$G(\mathbf{x},\mathbf{y},\omega)=G^0(\mathbf{x},\mathbf{y},\omega)+\int d^3x_1d^3x_1'G^0(\mathbf{x},\mathbf{x}_1,\omega)$$

$$\times \Sigma^{\star}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1')G(\mathbf{x}_1', \mathbf{y}, \omega). \tag{10.6}$$

相应地，方程 (10.4) 归结为

$$\begin{aligned}\hbar\Sigma^{\star}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1') = &-i(2s+1)\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1') \\ &\times \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)(2\pi)^{-1} \int d\omega e^{i\omega\eta} \\ &\times G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2, \omega) + iV(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')(2\pi)^{-1} \\ &\times \int d\omega e^{i\omega\eta} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1', \omega).\end{aligned} \tag{10.7}$$

引入 H_0 的正交归一的本征函数的完全集合将是方便的，

$$H_0\varphi_j^0(\mathbf{x}) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x})\right]\varphi_j^0(\mathbf{x}) = \varepsilon_j^0\varphi_j^0(\mathbf{x}). \tag{10.8}$$

这些单粒子态构成相互作用图象中场算符 $\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}t)$ 的自然基底，无相互作用的 Green 函数于是成为

$$\begin{aligned}iG^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = &\sum_j \varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^* \exp\left[\frac{-i\varepsilon_j^0(t-t')}{\hbar}\right] \\ &\times [\theta(t-t')\langle\Phi_0|a_j a_j^\dagger|\Phi_0\rangle \\ &- \theta(t'-t)\langle\Phi_0|a_j^\dagger a_j|\Phi_0\rangle] \\ = &\sum_j \varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^* \exp\left[\frac{-i\varepsilon_j^0(t-t')}{\hbar}\right] \\ &\times [\theta(t-t')\theta(\varepsilon_j^0 - \varepsilon_F^0) \\ &- \theta(t'-t)\theta(\varepsilon_F^0 - \varepsilon_j^0)],\end{aligned} \tag{10.9}$$

这里 ε_F^0 是最后填充的态的能量．完全像方程 (7.44) 中那样计算 Fourier 变换，这给出

$$\begin{aligned}G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = &\sum_j \varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^* \\ &\times \left[\frac{\theta(\varepsilon_j^0 - \varepsilon_F^0)}{\omega - \hbar^{-1}\varepsilon_j^0 + i\eta}\right. \\ &\left. + \frac{\theta(\varepsilon_F^0 - \varepsilon_j^0)}{\omega - \hbar^{-1}\varepsilon_j^0 - i\eta}\right].\end{aligned} \tag{10.10}$$

现在我们可计算未微扰基态$|\Phi_0\rangle$的粒子密度$n^0(\mathbf{x})$，

$$n^0(\mathbf{x}) = -i(2s+1)(2\pi)^{-1}\int d\omega e^{i\omega\eta}G^0(\mathbf{x},\mathbf{x};\omega)$$

$$= (2s+1)\sum_j |\varphi_j^0(\mathbf{x})|^2\theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0), \qquad (10.11)$$

而总粒子数则由下式给出

$$N^0 = \int d^3x n^0(\mathbf{x}) = (2s+1)\sum_j \theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0), \qquad (10.12)$$

这里已假定单粒子波函数为归一化的.

方程 (10.6) 到 (10.8) 以及方程 (10.10) 确定了自洽 Green 函数G的一组联立方程. 既然Σ^*与频率无关，自然就寻找与G^0形式相同的解G:

$$G(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega)$$

$$= \sum_j \varphi_j(\mathbf{x})\varphi_j(\mathbf{x}')^*\left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta}\right.$$

$$\left. + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta}\right], \qquad (10.13)$$

这里$\{\varphi_j(\mathbf{x})\}$表示能量为$\epsilon_j$的单粒子波函数的完全集合，而$\epsilon_F$是最后填充的态的能量. 在相互作用系统中相应的粒子密度成为

$$n(\mathbf{x}) = (2s+1)\sum_j |\varphi_j(\mathbf{x})|^2\theta(\epsilon_F - \epsilon_j), \qquad (10.14)$$

而

$$N = N^0 = (2s+1)\sum_j \theta(\epsilon_F - \epsilon_j), \qquad (10.15)$$

因为微扰$\hat{H}_1$保持总粒子数守恒. 这样，相互作用仅仅移动单粒子能级，这些单粒子能级仍然是填满到能量为 Fermi 能为止. 方程 (10.7) 中的频率积分现在可以直接算出，我们求得$\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_1') = (2s+1)\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')$

$$\times \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \sum_j |\varphi_j(\mathbf{x}_2)|^2 \theta(\epsilon_F - \epsilon_j)$$
$$- V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1') \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}_1)\varphi_j(\mathbf{x}_1')^* \theta(\epsilon_F - \epsilon_j)$$
$$= \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1') \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) n(\mathbf{x}_2)$$
$$- V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1') \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}_1)\varphi_j(\mathbf{x}_1')^* \theta(\epsilon_F - \epsilon_j). \tag{10.16}$$

注意 Σ^* 与 φ_j 有关；于是方程 (10.6) 和 (10.16) 的结合给出用 φ_j^0 (假定已知)表示 φ_j 的非线性积分方程.

这个方程可用下面的微分算符简化

$$L_1 = \hbar\omega + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - U(\mathbf{x}_1) = \hbar\omega - H_0.$$

如果把 L_1 作用于 $G^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1', \omega)$，我们得到

$$L_1 G^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1', \omega) = \sum_j (\hbar\omega - \epsilon_j^0)\varphi_j^0(\mathbf{x}_1)\varphi_j^0(\mathbf{x}_1')^*$$
$$\times \left[\frac{\theta(\epsilon_j^0 - \epsilon_F^0)}{\omega - \epsilon_j^0/\hbar + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_j^0)}{\omega - \epsilon_j^0/\hbar - i\eta}\right]$$
$$= \hbar \sum_j \varphi_j^0(\mathbf{x}_1)\varphi_j^0(\mathbf{x}_1')^*$$
$$= \hbar\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1'),$$

这里最后一行是由于所假定的集合 $\{\varphi_j^0\}$ 的完全性. 这样，$\hbar^{-1}L_1$ 是逆算符 $(G^0)^{-1}$，而 L_1 作用于方程 (10.6) 给出

$$L_1 G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1', \omega) = \hbar\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')$$
$$+ \int d^3x_2 \hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1', \omega).$$

将 G 和 L_1 的显式代入是有益的；

$$\left[\hbar\omega + \frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} - U(\mathbf{x}_1)\right] \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}_1)\varphi_j(\mathbf{x}_1')^*$$
$$\times \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta}\right]$$

$$-\int d^3x_2\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\sum_j\varphi_j(\mathbf{x}_2)\varphi_j(\mathbf{x}_1')^*$$

$$\times\left[\frac{\theta(\epsilon_j-\epsilon_F)}{\omega-\hbar^{-1}\epsilon_j+i\eta}+\frac{\theta(\epsilon_F-\epsilon_j)}{\omega-\hbar^{-1}\epsilon_j-i\eta}\right]$$

$$=\hbar o(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1').$$

乘以 $\varphi_k(\mathbf{x}_1')$ 并对 $\mathbf{x}_1'$ 积分. $\{\varphi_j\}$ 的正交性导致对 $\varphi_j(\mathbf{x}_1)$ 的简单的准 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m}+U(\mathbf{x}_1)\right]\varphi_j(\mathbf{x}_1)+\int d^3x_2\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)\varphi_j(\mathbf{x}_2)$$

$$=\epsilon_j\varphi_j(\mathbf{x}_1), \tag{10.17}$$

其中正规自能 $\hbar\Sigma^*$ 的作用好像一个静态的非定域势. 既然 Σ^* 是厄密的且与 j 无关，关于正交性的通常证明维持不变，因而证实开始的假设是正当的. 方程 (10.16) 表明 Σ^* 由两项组成：一个是正比于粒子密度的定域(直接的)项，另一个是非定域(交换的)项. 这些方程正是我们从原子理论熟悉的 Hartree-Fock 方程[1].

显然，这些方程构成一个很复杂的问题：假设已知初始的一组单粒子波函数和能量，相应的 Σ^* 则用方程 (10.16) 计算. 于是方程(10.17)成为单体本征值方程，它决定了一组新的本征函数和本征值，而这组新的本征函数和本征值又用来重新计算 Σ^*. 这个过程继续进行，直到 $\{\varphi_j\}$ 和 $\{\epsilon_j\}$ 二者都得到自洽解为止. 于是，把方程 (7.23) 适当地推广以包括外势 $U(\mathbf{x}_1)$ 就可以算出基态能量

$$E=-\frac{1}{2}i(2s+1)\int d^3x_1\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta}$$

---

1) D. R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **24**: 89; 111 (1928); J. C. Slater, *Phys Rev.*, **35**: 210 (1930); V. Fock, *Z. Physik*, **61**: 126 (1930).

$$\times \lim_{\mathbf{x}_1' \to \mathbf{x}_1} \left[\hbar\omega - \frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} + U(\mathbf{x}_1)\right] G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1', \omega)$$

$$= -i(2s+1)\int d^3x_1 \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}_1)^*$$

$$\times \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega\eta} \left\{\frac{1}{2}\hbar\varphi_j(\mathbf{x}_1) + \left[\epsilon_j\varphi_j(\mathbf{x}_1)\right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{1}{2}\int d^3x_2 \hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\varphi_j(\mathbf{x}_2)\right]\right.$$

$$\left.\times \left[\frac{\theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \hbar^{-1}\epsilon_j - i\eta}\right]\right\}$$

$$= (2s+1)\sum_j \epsilon_j\theta(\epsilon_F - \epsilon_j) - \frac{1}{2}(2s+1)$$

$$\times \int d^3x_1 d^3x_2 \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}_1)^*$$

$$\times \hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\varphi_j(\mathbf{x}_2)\theta(\epsilon_F - \epsilon_j), \qquad (10.18)$$

本页第二、三行是用方程(10.17)得到的，最后一行是用方程(9.37)和一个迴路积分得到的．这个表示式的第一项具有简单的解释，即所有被占据的态的能量之和．各个单粒子态已体现了其余粒子通过非定域自洽势 $\hbar\Sigma^*$ 对它的作用．可是，在计算基态能量时，方程(10.18)的第一项本身就两次地计入了相互作用能量；这个重复计数就由第二项扣去．方程(10.16)和(10.18)的结合给出

$$E = (2s+1)\sum_j \epsilon_j\theta(\epsilon_F - \epsilon_j) - \frac{1}{2}(2s+1)$$

$$\times \sum_{jk} \theta(\epsilon_F - \epsilon_j)\theta(\epsilon_F - \epsilon_k)\int d^3x_1 \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$$

$$\times [(2s+1)|\varphi_j(\mathbf{x}_1)|^2|\varphi_k(\mathbf{x}_2)|^2$$

$$- \varphi_j(\mathbf{x}_1)^*\varphi_k(\mathbf{x}_1)\varphi_k(\mathbf{x}_2)^*\varphi_j(\mathbf{x}_2)], \qquad (10.19)$$

这就是通常的 Hartree-Fock 结果．

在方程（10.19）的方括号中的两项分别给出直接的能量和交换的能量．对于粒子间短程势（例如在核物理中），直接项和交换项在数值上是可比拟的；对粒子间长程势（例如在原子物理中），交换作用的贡献通常远小于直接作用的贡献．确实，在决定原子的自洽能级时，有时完全忽略交换项，而相应的方程通常称作自洽的 Hartree 方程．在短程和长程势之间的上述差别的物理基础如下：不相容原理阻止自旋相同的两个粒子占据同一个单粒子态．结果在与粒子间距可相比拟的一个区域内，平行自旋的两粒子密度相关函数处处为零．如果势的作用程比粒子间距小，则这个不相容的空穴对于决定基态能量是关键性的．反之，长程势伸展得远远超过粒子间距，于是这不相容空穴只起次要的作用（比较习题 4.1 和 5.10，它们明显地展现出这种差别）．

对于一般的外势 $U(\mathbf{x})$，Hartree-Fock 方程很难解出，因为单粒子波函数 $\varphi_i(\mathbf{x})$ 和能量 ϵ_i 两者都必须自洽地定出．对均匀系统，$U(\mathbf{x})$ 为零，正规自能取形式 $\Sigma^*(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$，这些方程就变成简单得多．容易验证平面波 $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = V^{-\frac{1}{2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ 满足自洽的要求，因为它是方程（10.17）的解．相应的自洽的单粒子能量成为

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon^0_{\mathbf{k}} + \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}), \tag{10.20}$$

其中

$$\begin{aligned}\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}) &= \int d^3(x-x')e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\ &= (2s+1)V(0)(2\pi)^{-3}\int d^3k'\theta(k_F-k') \\ &\quad -(2\pi)^{-3}\int d^3k'V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\theta(k_F-k') \\ &= nV(0) - (2\pi)^{-3}\int d^3k'V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\theta(k_F-k').\end{aligned} \tag{10.21}$$

基态能量 (10.18) 归结为简单的形式

$$E = (2s+1)V(2\pi)^{-3}\int d^3k \left[\varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2}\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{k})\right]\theta(k_F - k)$$

$$= (2s+1)V(2\pi)^{-3}\int d^3k \left[\varepsilon^0_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{k})\right]\theta(k_F - k), \tag{10.22}$$

这表明，自能修改了无相互作用系统的基态能量．有意思的是，对于均匀介质，这些自洽的表示式完全等同于第一级微扰论中算出的贡献 [方程 (9.35) 和 (9.36)]．这里之所以相等，完全是由于均匀系统的未微扰(平面波)本征函数也是自洽的本征函数；但是，对于非均匀系统，自洽的计算显然要比第一级的表示式走得远得多．

11. 非理想 Fermi 气体

现在详细地研究具有短程的强相斥势 ("刚性核") 的稀薄 Fermi 气体[1]．这个系统具有相当大的内在意义，而且按照 Brueckner 的建议[2] 它又构成研究核物质和 He^3 的基础．基本的结果如下．虽然势可以很强并且是奇异的，但对于这样的相互作用，散射振幅却可以是很小的．为确定起见，我们假定势是纯粹排斥性的，且具有一个强的短程核心，因而完全不考虑自我束缚的液体．任何真实的势，显然必须有这样的排斥核心；否则不会有平衡的密度，系统将坍塌 (见习题 1.2.)．特定地说，核与核之间的势有一个排斥的核心，它起源于强相互作用的介子云；而 He^3 与 He^3 之间的势有一个排斥的核心，它来

1) 我们追随 V. M. Galitskii 的分析．*Sov. Phys.*-JETP, **7:104** (1958).

2) K. A. Brueckner "Theory of Nuclear Structure", 见 C. Dewitt (ed.), "Many-Body Problem" p.47, John Wiley and Sons, Inc., New York 1959.

源于电子间的相互作用.

刚球散射

为了用例子说明这些议论，考虑两个粒子的散射，它们通过力程为 a 而强度为 $V_0 > 0$ 的强的排斥势而相互作用(图11.1). 无限硬的核显然对应于极限 $V_0 \to \infty$. 势的空间Fourier 变换，正是散射振幅的 Born 近似；散射振幅正比于 V_0，因而对刚性核是发散的.

$$V(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) d^3x \to \infty (V_0 \to \infty). \qquad (11.1)$$

事实上，真实的散射振幅由分波展开式给出[1]

$$f(k,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta). \qquad (11.2)$$

既然 Schrödinger 方程在势外区域极易求解，用波函数在 $r=a$

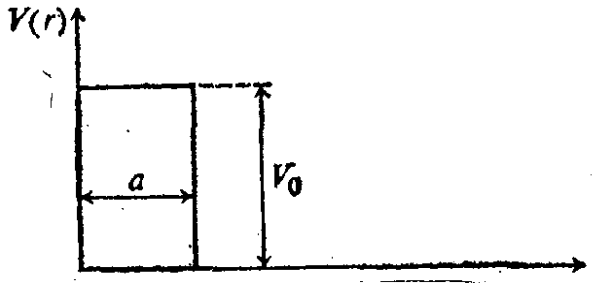


图11.1 矩形阱的排斥势.

为零的边界条件，可得到各个相移的显式，则我们求得著名的表示式

$$\begin{cases} \delta_l(k) = -\dfrac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} & (ka \to 0, l > 0), \\ \delta_0(k) = -ka \quad (ka \to 0). \end{cases} \qquad (11.3)$$

1) 关于本节所用的散射理论的基本原理，读者可参阅任何一本标准的量子力学教科书，例如，L. I. Schiff, "Quantum Mechanics, 3d. ed, §19, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968.

这里 $(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l-1)(2l+1)$. 因此在刚性核力程为零的极限下，散射振幅为零，这在物理上是显然的. 反之，对于刚性核力程的一切值，势的 Fourier 变换[方程 (11.1)] 都是无穷大.

这个结论可用另一个方法来验证. 考虑质量为 m，相互作用势为 V 的两个粒子的 Schrödinger 方程. 在质心坐标系中，这个 Schrödinger 方程由下式给出

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{k}) = v(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}), \tag{11.4}$$

这里 $\mathbf{x}$ 是两粒子的间隔，而

$$v(\mathbf{x}) \equiv \frac{2m_{\text{red}}V(\mathbf{x})}{\hbar^2} \equiv \frac{mV(\mathbf{x})}{\hbar^2}, \tag{11.5}$$

$m_{\text{red}} = \frac{1}{2}m$ 是约化质量. 在散射问题中，用出射波的 Green 函数

$$\begin{aligned} G^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}}{P^2 - k^2 - i\eta} \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \end{aligned} \tag{11.6}$$

把方程(11.4)改写为积分方程一般说来比较方便. 函数 $G^{(+)}$ 满足微分方程

$$(\nabla_{\mathbf{x}}^2 + k^2)G^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = -\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}), \tag{11.7}$$

而 Green 定理给出散射波函数 $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x})$ 所满足的下列方程，$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x})$ 表示波矢为 $\mathbf{k}$ 的入射平面波加上出射的散射波:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \int d^3y\, G^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})v(\mathbf{y})\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{y}). \tag{11.8}$$

$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x})$ 的渐近形式等于

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k})\frac{e^{ikx}}{x} \quad (x \to \infty),$$

这定义了从入射波矢 $\mathbf{k}$ 到终末波矢 $\mathbf{k}'$ 的跃迁的散射振幅

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -(4\pi)^{-1} \int d^3y e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}} v(\mathbf{y}) \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{y}). \quad (11.9)$$

对任一有限力程的势 $v(\mathbf{x})$，方程 (11.9) 都是正确的，我们现在可以就一个刚性核来检验它的行为. 在这极限下，凡 v 为无限大之处，$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ 为零，因而散射振幅仍为有限. 这样，势使波函数从未微扰的形式剧烈地改变了，这效应在 Born 近似下[方程(11.1)]是完全不存在的. 对这种奇异的势，方程(11.9)的任何微扰展开式最好也不过是慢慢地收敛，因此，如果要恰当地计入波函数的修改，则准确地解出积分方程是很重要的. 这个准确的解显然包含了微扰论的一切级.

动量空间中的散射理论

上述讨论限制在坐标表象中，但是把所有的量在动量空间中表示出来，对现在的分析更为有用. 由于所得到的 Schrödinger 方程较不为人熟悉，我们较详细地推导这些表示式. 用定义

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}), \quad (11.10\,a)$$

$$v(\mathbf{p}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} v(\mathbf{x}), \quad (11.10\,b)$$

Schrödinger 方程可在动量空间中改写为

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - \frac{1}{P^2 - k^2 - i\eta} \times \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} - \mathbf{q}), \quad (11.11)$$

这里右边用到了方程 (11.6). 此外，引入一个修改过的散射振幅是有益的，它在动量空间写出是

$$\tilde{f}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \equiv -4\pi f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (2\pi)^{-3} \int d^3q v(\mathbf{q}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}' - \mathbf{q}), \quad (11.12)$$

方程 (11.11) 于是成为

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + \frac{\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{k})}{k^2 - P^2 + i\eta}. \qquad (11.13)$$

以 $v(\mathbf{q}-\mathbf{p})$ 乘方程 (1.13)，并对 $(2\pi)^{-3}\int d^3p$ 积分；一个初等代换给出

$$\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{k}) = v(\mathbf{p}-k) + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{v(\mathbf{p}-\mathbf{q})\mathcal{T}(\mathbf{q},\mathbf{k})}{k^2 - q^2 + i\eta}, \qquad (11.14)$$

这是用 v 表出的 $\mathcal{T}$ 的积分方程. 如前面所指出，甚至对奇异的势 ($v \to \infty$)，散射振幅 $\mathcal{T}$ 也有确定意义. 假如方程(11.14)展开为微扰级数，每一项各自发散；然而所有这些项之和必然保持有限. 注意求解方程 (11.14) 需要一切 $q^2 > 0$ 的函数 $\mathcal{T}(\mathbf{q},\mathbf{k})$，而不是只要 $q^2 = k^2$ 的 $\mathcal{T}(\mathbf{q},\mathbf{k})$；这可以说成不仅需要“能量壳层上”的 $\mathcal{T}$，而且需要“不在能量壳层上”的 $\mathcal{T}$.

如果势不具有束缚态，如本节始终假定的，则在给定的边界条件下的准确散射解构成态的一个完全集合，并且满足关系式

$$(2\pi)^{-3}\int d^3k\,\phi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x})\phi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}')^* = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \qquad (11.15)$$

注意到准确的波函数与未微扰波函数 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ 遵守一样的完全性关系式 [比较方程 (11.8) 的首项]，由此可校验方程 (11.15) 的数字因子. 方程 (11.10a) 和 (11.15) 的结合给出动量空间中的相应的完全性关系式

$$(2\pi)^{-3}\int d^3k\,\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}')^* = (2\pi)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \qquad (11.16)$$

以 $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}')^*$ 乘方程 (11.12)，并对 $\mathbf{k}$ 积分；上面的完全性关系式导至

$$(2\pi)^{-3}\int d^3k\,\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{k})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}')^* = v(\mathbf{p}-\mathbf{p}'),$$

这只不过是 v 的一个较复杂的写法. 现在以方程 (11.13) 的

复共轭代入这个关系式:

$$v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')=f(\mathbf{p},\mathbf{p}')+\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}f(\mathbf{p},\mathbf{k})\times f(\mathbf{p}',\mathbf{k})^*\frac{1}{k^2-p'^2-i\eta}.$$

但是势是厄密的,因而满足

$$v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')^*=v(\mathbf{p}'-\mathbf{p}),$$

这终于给出

$$f(\mathbf{p},\mathbf{p}')-f(\mathbf{p}',\mathbf{p})^*=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}f(\mathbf{p},\mathbf{k})f(\mathbf{p}',\mathbf{k})^*\times\left(\frac{1}{k^2-p^2+i\eta}-\frac{1}{k^2-p'^2-i\eta}\right).\tag{11.17}$$

如果 $\mathbf{p}$ 的大小等于 $\mathbf{p}'$ 的大小,则方程 (11.17) 的主值部分为零,我们求得

$$f(\mathbf{p},\mathbf{p}')-f(\mathbf{p}',\mathbf{p})^*=-2\pi i(2\pi)^{-3}\int d^3k f(\mathbf{p},\mathbf{k})f(\mathbf{p}',\mathbf{k})^*\times\delta(p^2-k^2),\quad(|\mathbf{p}|=|\mathbf{p}'|).\tag{11.18}$$

这里径向的 k 的积分易于算出. 此外,如果势是球对称的,则散射振幅 f 就只是 p^2 和 $\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}}'$ 的函数,因而上面这个关系式的左边成为 $2i\,\mathrm{Im}f$. 所得表示式

$$\mathrm{Im}f(\mathbf{p},\mathbf{p}')=\frac{-p}{16\pi^2}\int d\Omega_k f(\mathbf{p},\mathbf{k})f(\mathbf{p}',\mathbf{k})^*,\quad[|\mathbf{k}|=|\mathbf{p}|=|\mathbf{p}'|,\quad v=v(|\mathbf{x}|)]\tag{11.19}$$

是通常的光学定理对散射振幅的推广.

梯形图解和 Bethe-Salpeter 方程

以上讨论限于自由空间中的两粒子散射,现在转到复杂

得多的问题，即具有奇异的排斥势的相互作用的稀薄多粒子系集．由于核是刚性的，显然不能按相互作用势强度作任何直接的微扰展开．作为代替办法，必须先把排斥势效应结合到介质中两粒子的波函数中，只有这时，才能考虑多粒子背景是怎样影响了这一个相互作用对偶．

虽然势是奇异的，但稀薄的 Fermi 气体还是含有一个小参数，即 $k_F a$，k_F 是 Fermi 波数，a 是散射长度（对于刚球气体，这等于粒子直径）．因此我们预期基态能量具有如下形式的级数展开

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}[A + Bk_F a + C(k_F a)^2 + \cdots], \quad (11.20)$$

或是散射长度很小（$a \to 0$），或是密度很低（$k_F \to 0$），这级数就是有意义的．本节计算这级数的最前面三个系数．此外，对于具有真实密度的 Fermi 系统的实际的理论，这里发展的技巧可以作为基础．

真正的无限排斥核心，带来某些人为的复杂性，因为微扰展开式的每一项都发散．我们换一个办法，考虑一个强的但是有限的势［图 11.1，其中 $V_0 < \infty$］，只是在计算的末尾过渡到极限 $V_0 \to \infty$．如下面的计算所表明，这个步骤给出与 V_0 无关的有限的解．对这样一种有限的势，自由空间中的两粒子散射方程 (11.8) 和 (11.9) 可展开为

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} &- \int d^3y\, G^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})v(\mathbf{y})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \\ &+ \int d^3y\, d^3z\, G^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})v(\mathbf{y}) \\ &\times G^{(+)}(\mathbf{y}-\mathbf{z})v(\mathbf{z})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} + \cdots, \quad (11.21\,a)\end{aligned}$$

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -(4\pi)^{-1}\int d^3y\, e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}}v(\mathbf{y})\phi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{y}). \quad (11.21\,b)$$

波函数的这些项具有简单的解释，即未微扰的解加上有一次

或多次重复相互作用的传播. 我们可以把 $-4\pi f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ 的微扰级数（Born 级数）中的各项明白地图解于图 11.2（构图的规则一看就知道了）. 这些不是 Feynman 图解，但也是描绘散射振幅的不含时间微扰级数中有贡献的那些项的一个方法. 弱的排斥势可用方程 (11.21) 开头少数几项作恰当的描写，但强的排斥势则需要所有的项. 如方程（11.21 a）所显示，高级项代表势对波函数的修正，而级数的和给出准确的波函数.

类似地，对于强排斥势，第一级正规自能 $\hbar\Sigma^{\mathrm{R}}_{(1)}$（图 10.1）是完全不够的，我们必须保留经过挑选的一类高级 Feynman 图解. 根据现在的讨论，必须保留哪些图形已经很清楚了；相互作用每次出现，就必须容许它重复作用，以便包括势对波函

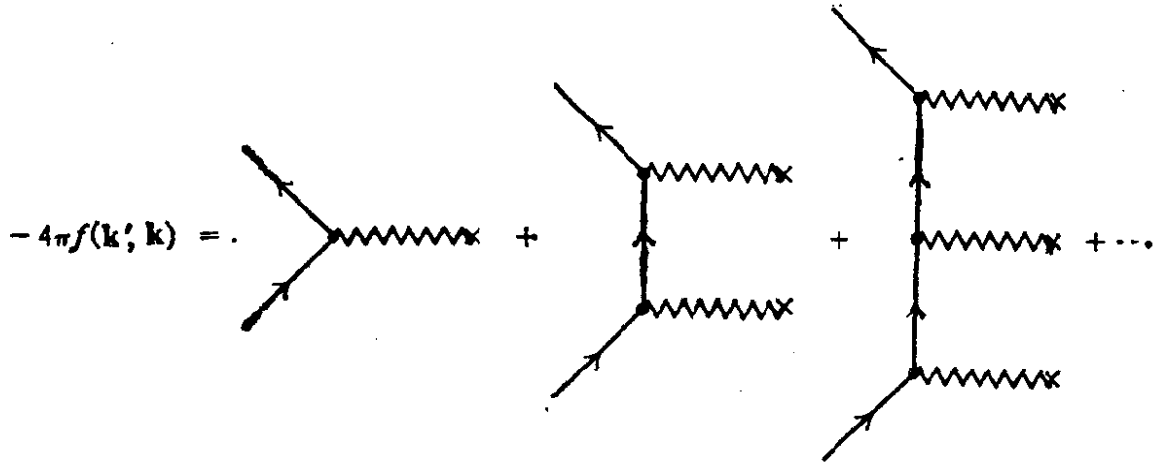


图 11.2　自由空间中两体散射振幅的微扰展开式.

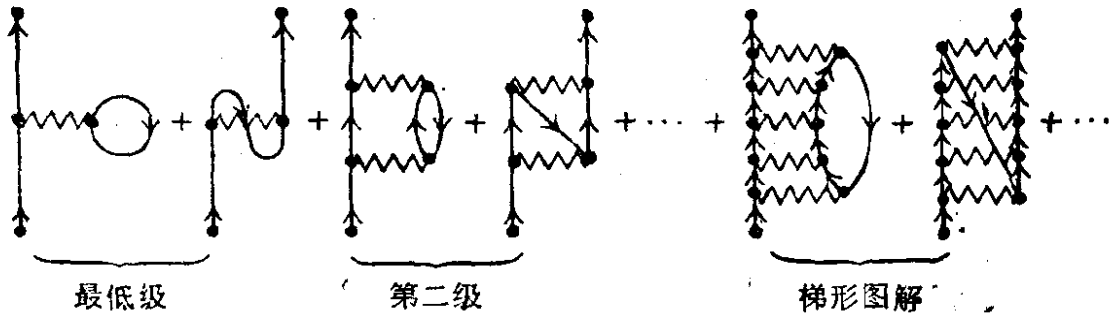


图 11.3　正规自能的梯形 Feynman 图解的和.

数的影响，从而给出一个有确定意义的乘积 $v\psi$. 换句话说，在两个粒子碰撞中，重要的量是，有介质存在时的两体散射振幅，这个量甚至对奇异的两体势仍然有完全确定的值. 因此，我们保留图 11.3 所示的全部梯形图解；这种选择明显是前述讨论的推广，因为图 11.3 中的这些项是 Feynman 图解，从而既包含空穴也包含粒子的传播. 特别是，我们只把这样的梯形图解求和，这些梯形图解是在带有相同走向的箭头的 Green 函数之间的. 既然两粒子相互作用是瞬时作用，这组图解包括了所有这样的过程作为子集，在这些过程的每一步，两个中间费米子都是 Fermi 海以上的粒子. 这种粒子-粒子贡献来自时间上向前传播的 Feynman 传播函数的粒子部分.

如下所示，对刚球 Fermi 气体，从图 11.3 中的图解足以得出方程 (11.20) 的前三项. 这个结果有一个直接的物理解释：展开式的第一项是无相互作用的 Fermi 系统的能量. 与散射长度成线性关系的第二项代表被介质中其它粒子向前散射（包括直接散射与交换散射）. 这种看法的理由是，低密度 ($k_F \to 0$) 使我们可以只考虑低能碰撞，这时自由粒子散射振幅退化为常数

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \to -a \quad (k = k' \to 0). \tag{11.22}$$

虽然在刚性球情况下方程 (11.22) 可直接从方程 (11.2) 和 (11.3) 导出，它也可以作为 s 波散射长度 a 的一般定义. 然而，存在介质时，实际的散射振幅不同于 f，因为其它粒子限制了可被相互作用粒子对偶所用的中间态. 当一个粒子激发到 Fermi 海以上的能量，然后又解除激发，就出现 Pauli 原理的限制；如果图 11.3 中梯形图解的和改用自由散射长度表出，上述效应对基态能量给出的改正的数量级为 $(k_F a)^2$.

对基态能量有贡献的任何其他过程，至少包括三次不同的碰撞，从而对方程 (11.20) 给出的贡献的数量级为 $(k_F a)^3$.

特别是，考虑图 11.4 所示的 Feynman 图解，这里有阴影线的方框表示梯形图解的和. 这些过程清楚地包含着一个中间粒子和空穴的散射，这实际上代表在 Fermi 海内又一个粒子转移，它填充了原来的空穴而在它的位置上留下了一个新的空穴. 这样，粒子和空穴之间的碰撞总是包含一个额外的粒子，而引入 $k_F a$ 的额外的一次幂. 从方程 (11.2) 和 (11.3) 显见，在相对的 p 态中，两体碰撞也导致数量级为 $(k_F a)^3$ 的改正，这在我们的近似中又是可忽略的. 在本节末尾，我们将较详细地证明我们对图解所作的选择是正确的.

在着手详细分析梯形图解的和之前，我们现在证明，先前的讨论立即给出级数 (11.20) 中的头两项. 考虑自旋为 1/2 的费米子系统，通过与自旋无关的非奇异的势而相互作用. 于是，从方程 (10.21) 和 (10.22) 得出最低级的基态能量

$$\frac{E}{V} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\frac{N}{V} + \frac{1}{2}2\int^{k_F}\frac{d^3k}{(2\pi)^3} \times \int^{k_F}\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}[2V(0) - V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')]. \quad (11.23)$$

但是对非奇异的势，方程 (11.9) 和(11.22)表明

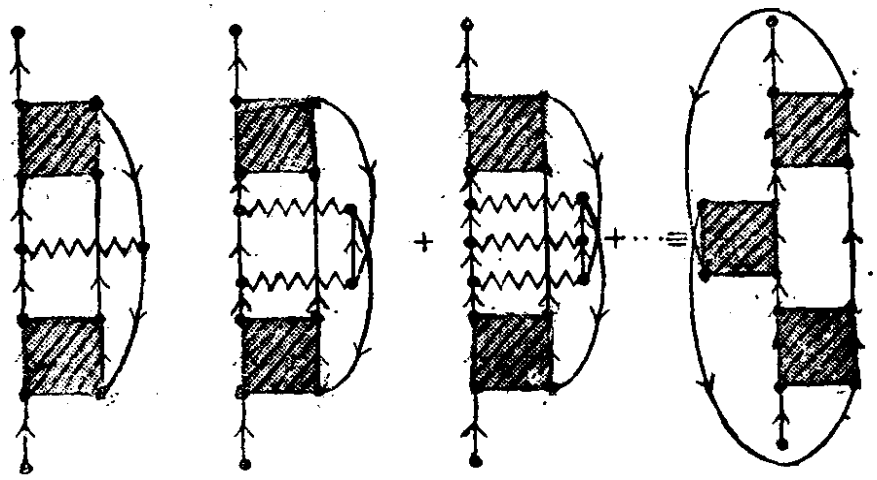


图 11.4　在梯形近似中略去的对 Σ^* 的一类附加的贡献.

$$V(0) \equiv \int d^3x V(x)$$

$$= -\frac{4\pi\hbar^2}{m} f_B(\mathbf{k},\mathbf{k}) \xrightarrow[k\to 0]{} \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_B, \qquad (11.24)$$

这里下标 B 表示用代换 $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{x}) \longrightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ 得到的 Born 近似. 很清楚，关于被介质中粒子散射的描写可用下列简单替换改进

$$a_B \longrightarrow a. \qquad (11.25)$$

这里 a 是自由的两体散射的实际散射长度，甚至对于奇异的势，它仍有确定的值. 在低密度极限下，$k_F \to 0$，可以进一步在积分号下取近似

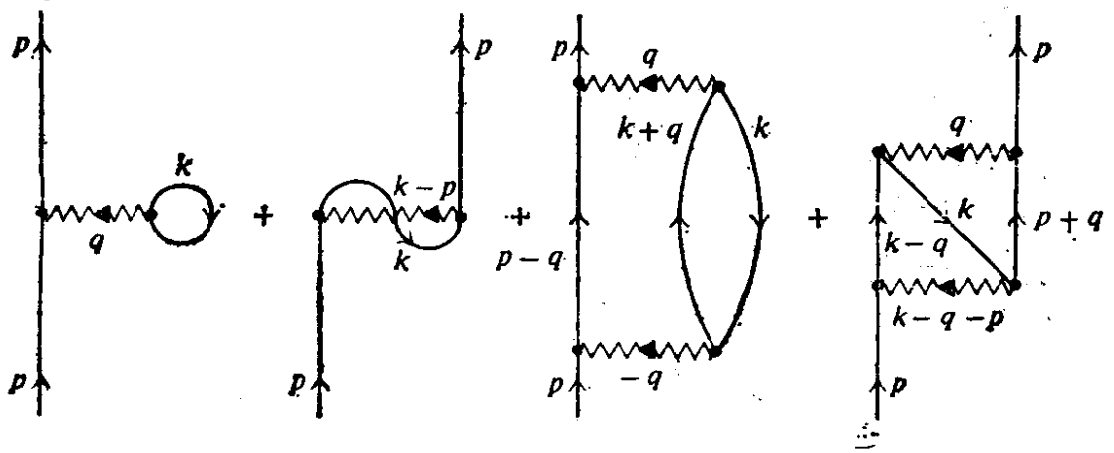


图 11.5　$\Sigma^{\star}$ 的梯形近似的头两级.

$$V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \approx V(0),$$

这样，方程 (11.23) 成为

$$E = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} N + \frac{1}{2}\frac{N}{V}\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\frac{N}{2}.$$

密度和 Fermi 波数之间的标准关系式 (3.29) $N/V = k_F^3/3\pi^2$，于是给出

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\left(\frac{3}{5} + \frac{2}{3\pi^2} k_F a + \cdots\right). \qquad (11.26)$$

Lenz[1] 从折射率和向前散射振幅之间的关系推得一个等价的结果.

记住这些论点,我们现在转向基本近似,即是在正规自能 $\Sigma^{\star}$ 的计算中只保留图 11.3 的 Feynman 图解. 为了阐明各个因子,我们先集中注意于图 11.5 所示的动量空间中的第一和第二级贡献. 用第 9 节的 Feynman 规则计算 $\Sigma^{\star}$ 是直截了当的,第一级贡献由下式给出[比较方程 (9.23)]

$$\hbar\Sigma^{\star}_{(1)}(p) = -2iU(0)(2\pi)^{-4}\int d^4k G^0(k)e^{ik_0\eta} + i(2\pi)^{-4}\int d^4k G^0(k)U_0(k-p)e^{ik_0\eta}, \quad (11.27)$$

这里已假定相互作用与自旋无关. 第二级贡献带来下列附加的元素:

1. 两个额外的因子 G^0,
2. 一个额外的相互作用线 U_0,
3. 一个额外的独立的四维动量(比较图 11.5),
4. 一个额外的因子 $(i/\hbar)(2\pi)^{-4}$.

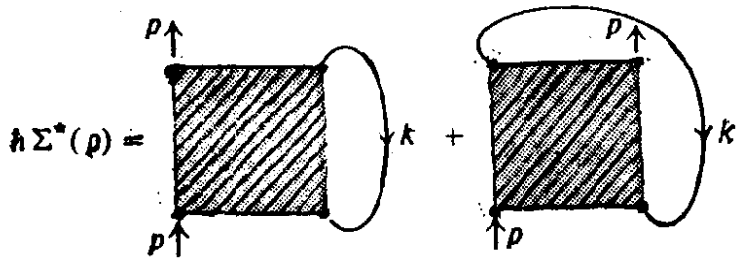


图 11.6 梯形近似中的正规自能.

这些因子可以和 Feynman 规则结合起来给出二级贡献

$$\hbar\Sigma^{\star}_{(2)}(p) = 2\hbar^{-1}(2\pi)^{-8}\int d^4k G^0(k)\int d^4q U_0(q)G^0(p-q)$$

---

1) W. Lenz, *Z. Physik*, **56**: 778(1929).

$$\times G^0(k+q)U_0(-q) - \hbar^{-1}(2\pi)^{-8}\int d^4k G^0(k)$$

$$\times \int d^4q U_0(q)G^0(p+q)G^0(k-q)\,U_0(k-q-p).$$

显然，这个步骤可进行下去直到一切级，$\Sigma^*(p)$的一般形式将是（见图 11.6）

$$\hbar\Sigma^*(p) = -2i(2\pi)^{-4}\int d^4k G^0(k)\Gamma(pk;pk) + i(2\pi)^{-4}$$

$$\times \int d^4k G^0(k)\Gamma(kp;pk), \qquad (11.28)$$

这里定义了有效的两粒子相互作用 $\Gamma(p_1p_2;\ p_3p_4)$，它可解释为介质中的推广的散射振幅．在这个特定的例子中，Γ 包括重复的(梯形)相互作用的和（图 11.7），因此具有形式

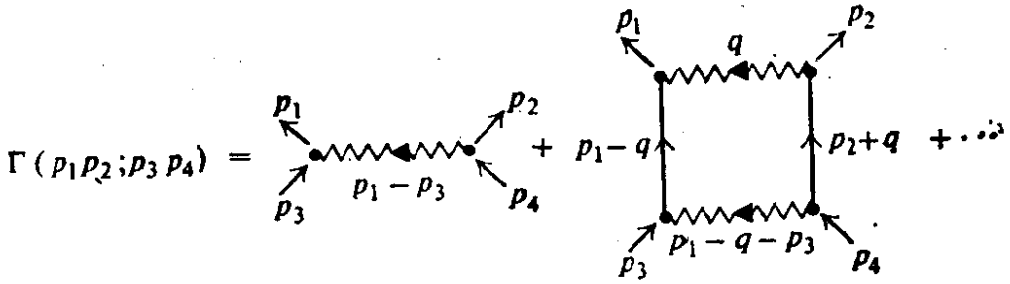


图 11.7　梯形近似下的有效相互作用的级数展开式．

$$\Gamma(p_1p_2;\ p_3p_4) = U_0(p_1-p_2) + i\hbar^{-1}(2\pi)^{-4}\int d^4q U_0(q)$$

$$\times G^0(p_1-q)G^0(p_2+q)$$

$$\times U_0(p_1-q-p_3) + \cdots. \qquad (11.29)$$

梯形图解的这个和现在可以改写为 Γ 的积分方程，它自动地包括了一切级 [图 11.8 和方程 (11.30)]，

$$\Gamma(p_1p_2;\ p_3p_4) = U_0(p_1-p_2) + i\hbar^{-1}(2\pi)^{-4}\int d^4q U_0(q)$$

$$\times G^0(p_1-q)G^0(p_2+q)$$

$$\times \Gamma(p_1-q,\ p_2+q;\ p_3p_4). \qquad (11.30)$$

与相对论性的场论中的相似方程相类比，方程（11.30）称为 Bethe-Salpeter 方程[1]（更确切地说，是 Bethe-Salpeter 方程的梯形近似）. 如果假定 U_0 很小，把这个方程按微扰论展开，

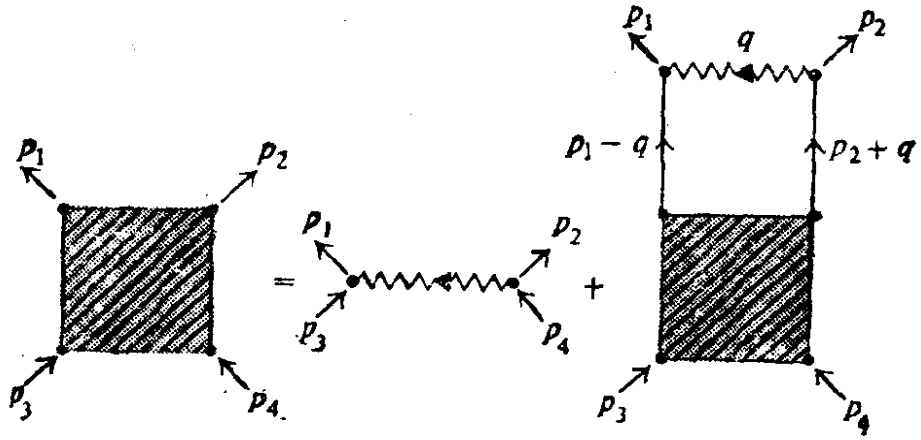


图 11.8　有效相互作用的 Bethe-Salpeter 方程.

我们就得到所有梯形图解的和（图 11.7）. 它的头两项精确地再现了方程（11.29）的头两项，它保证了符号和数字因子都是正确的；具体地说，因子 $i/\hbar$ 恰好与微扰 U_0 的额外一级相联系.

Σ^* 的计算现在归结为求方程（11.30）的解 Γ. 虽然 Γ 联系于两粒子 Green 函数，但是找出 Γ 与自由空间中散射振幅 f 之间的相似性是更有益的. 诚然，到势的最低级为止，Γ 正好等于 Fourier 变换 U_0. 现在我们继续这个类比，引入介质中两粒子有效波函数 Q [比较方程（11.12）和（11.13）]:

$$\Gamma(p_1p_2;\ p_3p_4) \equiv (2\pi)^{-4} \int d^4q U_0(q) \times Q(p_1 - q,\ p_2 + q;\ p_3p_4). \quad (11.31)$$

只有当 Q 满足下列积分方程时，Γ 的这个表示才与方程（11.30）一致.

---

1) E. E. Salpeter and H. A. Bethe *Phys., Rev.* **84**: 1232 (1951).

$$Q(p_1p_2;p_3p_4)=(2\pi)^4\delta^{(4)}(p_1-p_3)+i\hbar^{-1}G^0(p_1)G^0(p_2)(2\pi)^{-4}$$
$$\times\int d^4qU_0(q)Q(p_1-q,p_2+q;p_3p_4). \quad (11.32)$$

给动量变量加上标记，正确安排它们的顺序需要相当仔细，读者务必细致地验证这些方程.

引入总的质心波矢量 P 和相对波矢量 p, p'，这将是方便的，引入定义：

$$P=p_1+p_2=p_3+p_4,$$

(其中后一等式是由于均匀系中四维动量守恒)

$$p=\frac{1}{2}(p_1-p_2), \qquad p'=\frac{1}{2}(p_3-p_4).$$

此外，由于相互作用是瞬时的，$U_0(q)=U_0(\mathbf{q})$ 与频率 q_0 无关；对于相互作用粒子对偶的一定的质心四维动量 $\hbar P$，我们可算出方程 (11.32) 的频率积分. 把方程 (11.32) 就相对频率 $(2\pi)^{-1}\int dP_0$ 进行积分，并定义下面这个量

$$\chi(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)=(2\pi)^{-1}\int_P dp_0$$
$$\times Q\left(\frac{1}{2}P+p,\frac{1}{2}P-p;\frac{1}{2}P+p',\frac{1}{2}P-p'\right)$$
$$=(2\pi)^{-1}\int_P dp_0Q(p_1p_2;p_3p_4). \quad (11.33)$$

简单的整理于是给出 χ 的积分方程

$$\chi(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)=(2\pi)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')+i\hbar^{-1}(2\pi)^{-1}$$
$$\times\int dp_0G^0\left(\frac{1}{2}P+p\right)G^0\left(\frac{1}{2}P-p\right)$$
$$\times(2\pi)^{-3}\int d^3qU_0(\mathbf{q})\chi(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P), \quad (11.34)$$

方程 (11.39) 将表明，上式与自由空间中的散射振幅 [方程 (11.11)] 很相似. 如果把这方程重复迭代成为用 U_0 表示的

展开式，则每一项就显含变量 $(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P)$，这就是我们在方程 (11.33) 中采用那样的符号的理由.

现在需要计算方程 (11.34) 的最后一项的系数. 既然 G^0 有两项[方程 (9.14)]，被积函数总共有四项. 其中两项的二个极点都在实 p_0 轴的同一方；在这情况下，我们把积分迴路在另外那半平面上闭合起来，从而证明这两项没有贡献. 与此相反，余下两项各有一个极点在实轴上方，一个极点在实轴下方. 这两项贡献用迴路积分容易算出，我们求得

$$\frac{i}{\hbar}\int\frac{dP_0}{2\pi}G^0\left(\frac{1}{2}P+p\right)G^0\left(\frac{1}{2}P-p\right)$$

$$=\frac{\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{p}\right|-k_F\right)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{p}\right|-k_F\right)}{\hbar P_0-\epsilon^0\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{p}-\epsilon^0\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{p}+i\eta}$$

$$-\frac{\theta\left(k_F-\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{p}\right|\right)\theta\left(k_F-\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{p}\right|\right)}{\hbar P_0-\epsilon^0\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{p}-\epsilon^0\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{p}-i\eta}. \tag{11.35}$$

这表示式的物理解释如下：在图 11.3 所示中间态的一对相互作用粒子可以或者作为 Fermi 海上方的一对粒子 [方程 (11.35) 第一项] 或者作为 Fermi 海里面的一对空穴 [方程 (11.35) 第二项] 而传播. 既然 Feynman 图解包含一切可能的时间顺序，这两种传播方式都包括在图 11.8 的图解中.

引入相互作用粒子对偶在质心坐标系中的总能量

$$E\equiv\hbar P_0-\frac{\hbar^2\mathbf{P}^2}{4m} \tag{11.36}$$

和函数

$$N(\mathbf{P},\mathbf{p})\equiv 1-n^0\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{p}-n^0\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{p}, \tag{11.37}$$

可以简化方程 (11.35) 的形式，这里 $n^0_{\mathbf{p}}=\theta(k_F-p)$ 是未微

扰基态的占据数. 这样，

$$N(\mathbf{P},\mathbf{p})=\begin{cases}1 & \left(\text{当 } \frac{1}{2}\mathbf{P}\pm\mathbf{p} \text{ 两者都在 Fermi 海外}\right),\\ -1 & \left(\text{当 } \frac{1}{2}\mathbf{P}\pm\mathbf{p} \text{ 两者都在 Fermi 海内}\right),\\ 0 & \text{(对于其它情况).}\end{cases}$$

用这记号，方程 (11.35) 取紧凑的形式

$$\frac{i}{\hbar}\int\frac{dP_0}{2\pi}G^0\left(\frac{1}{2}P+p\right)G^0\left(\frac{1}{2}P-p\right)$$

$$=\frac{N(\mathbf{P},\mathbf{p})}{E^2-\hbar^2\mathbf{p}^2/m+i\eta N(\mathbf{P},\mathbf{p})},\qquad(11.38)$$

而方程 (11.34) 成为

$$\chi(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)=(2\pi)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')+\frac{N(\mathbf{P},\mathbf{p})}{E^2-\hbar^2\mathbf{p}^2/m+i\eta N(\mathbf{P},\mathbf{p})}$$

$$\times\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}U_0(\mathbf{q})\chi(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P).\qquad(11.39)$$

相应地，利用方程 (11.31) 和 (11.33)，Γ 可用质心坐标和相对波矢表示为:

$$\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)\equiv\Gamma\left(\frac{1}{2}P+p,\frac{1}{2}P-p;\frac{1}{2}P+p',\frac{1}{2}P-p'\right)$$

$$=(2\pi)^{-3}\int d^3qU_0(q)\chi(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P).\quad(11.40)$$

我们已经注意到方程 (11.39) 类似于自由空间中两粒子波函数 $\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p})$ 的散射方程[方程 (11.11)]. 但是，这里的方程较为复杂，因为不相容原理通过因子 N 限制了可用的中间态，此外也因为函数 Γ 必须就频率 P_0 的一切值进行计算[比较方程 (11.28)].

Galitskii 积分方程

到这里为止，这些方程一直是用粒子间势 U_0 写出的. 这样的方法决不能描写无限的排斥核，现在我们按照 Galitskii 的作法，把方程 (11.39) 和 (11.40) 改用自由空间中两粒子散射振幅 $\tilde{f}$ 写出. 的确，Γ 的最低级近似正比于 $\tilde{f}$，而高级改正来自多粒子背景. 为方便，定义下列约化变量

$$v \equiv mU_0\hbar^{-2}, \qquad \varepsilon \equiv mE\hbar^{-2}, \tag{11.41}$$

并考虑方程(11.39)的一个简化形式，即用 1 代替不相容原理的因子 N. 注意，当 $k_F \to 0$ 时，这个代换成为准确的，因此它描写的是低密度的极限情况. 如果 χ_0 表示方程 (11.39) 在 $N=1$ 时的相应的解，乘以 $\varepsilon - p^2 + i\eta$ 给出方程

$$\begin{aligned}(\varepsilon - p^2 + i\eta)\chi_0(\mathbf{p},\mathbf{p}',P) - (2\pi)^{-3}\int d^3q v(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P)\\ = (2\pi)^3(\varepsilon - p^2 + i\eta)\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\\ = (2\pi)^3(\varepsilon - p'^2 + i\eta)\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'),\end{aligned} \tag{11.42}$$

这里多余的 $i\eta$ 是为了保持与边界条件的联系. 作为比较，自由的 Schrödinger 方程 (11.11) 可以写为

$$\begin{aligned}(k^2 - p^2 + i\eta)\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) - (2\pi)^{-3}\int d^3q v(\mathbf{q})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\\ = 0,\end{aligned} \tag{11.43}$$

因为 $(k^2 - p^2 + i\eta)\delta(\mathbf{p}-\mathbf{k})$ 恒为零.

量 χ_0 现在可以只用自由的 Schrödinger 方程 (11.43) 的解表出如下:

$$\begin{aligned}\chi_0(\mathbf{p},\mathbf{p}',P) = (\varepsilon - p' + i\eta)\\ \times\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}')^*}{\varepsilon - k'^2 + i\eta}.\end{aligned} \tag{11.44}$$

把方程 (11.44) 代入方程 (11.42) 并且应用方程 (11.43) 和完全性关系式 [方程 (11.16)] 容易验证这个表示式. 于是与

方程 (11.13) 的复共轭相结合给出

$$\chi_0(\mathbf{p},\mathbf{p}',P) = \phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}) + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \times \left(\frac{1}{\varepsilon - k^2 + i\eta} + \frac{1}{k^2 - p'^2 - i\eta}\right) f(\mathbf{p}',\mathbf{k})^*.$$

最后，类比于方程 (11.40)，定义 Γ_0.

$$\Gamma_0(\mathbf{p},\mathbf{p}',P) = (2\pi)^{-3}\int d^3q U_0(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P)$$

$$= (2\pi)^{-3}\hbar^2 m^{-1}\int d^3q v(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P),$$

立即可得 Γ_0 的积分表示

$$\frac{m}{\hbar^2}\Gamma_0(\mathbf{p},\mathbf{p}',P) = f(\mathbf{p},\mathbf{p}') + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\mathbf{p},\mathbf{k}) \times \left(\frac{1}{\varepsilon - k^2 + i\eta} + \frac{1}{k^2 - p'^2 - i\eta}\right) \times f(\mathbf{p}',\mathbf{k})^*, \tag{11.45}$$

这里用到了方程 (11.12) 和 (11.41). 这个表示式具有很重要的特色，即它只含有自由粒子的散射振幅，这样，甚至对于奇异的排斥势仍然是有意义的.

函数 Γ_0 取决于参数 ε. 如果令 $\varepsilon = p'^2$，则

$$m\Gamma_0\hbar^{-2} = f(\mathbf{p},\mathbf{p}') \quad (\varepsilon = \mathbf{p}'^2), \tag{11.46}$$

这正是自由的散射振幅. 更一般地说，对于不在能量壳层上 (即 $p'^2 \neq \varepsilon$) 的散射，方程 (11.45) 确定了 Γ_0. 注意我们也需要不在能量壳层上的量 f，即两个动量宗量取一切值的 f. 但是在自由散射实验中，散射振幅 f 仅仅是在两个动量宗量大小相等 $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$ 情况下测量的(我们这里只考虑弹性散射). 这样，方程 (11.45) 实际上就不象乍看起来那么简单了，因为不在能量壳层上的 f 的计算，需要细致的模型，例如一个势 $V(\mathbf{x})$. 尽管如此，方程 (11.45) 仍是很有用的.

我们现在尝试求解介质中的完整散射函数χ. 用方程(11.41)的约化变量，准确的方程 (11.39) 成为

$$\chi(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)-\frac{N(\mathbf{P},\mathbf{p})}{\epsilon-p^2+i\eta N(\mathbf{P},\mathbf{p})}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$
$$\times v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P)=(2\pi)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'),$$

稍许重新整理给出

$$\chi(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)-\frac{1}{\epsilon-p^2+i\eta}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}',P)$$
$$=(2\pi)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')+\left(\frac{N(\mathbf{P},\mathbf{p})}{\epsilon-p^2+i\eta N(\mathbf{P},\mathbf{p})}\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\epsilon-p^2+i\eta}\right)\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p}',P),\qquad(11.47)$$

将方程 (11.42) 除以 $\epsilon-p^2+i\eta$ 然后与上式作比较，比较表明方程 (11.47) 左边的算符正好是 χ_0 的逆，这意思是说 χ 可用 χ_0 表示如下:

$$\chi(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)=\chi_0(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)+\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\chi_0(\mathbf{p},\mathbf{k},P)$$
$$\times\left[\frac{N(\mathbf{p},\mathbf{k})}{\epsilon-k^2+i\eta N(\mathbf{p},\mathbf{k})}-\frac{1}{\epsilon-k^2+i\eta}\right]$$
$$\times\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\mathbf{k},\mathbf{p}',P).$$

完成方程 (11.47) 左边的运算，并利用方程 (11.42)，就能验证上述方程. 现在取它与 v 的卷积[见方程(11.40)]，这给出介质中散射振幅的最终方程

$$\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)=\Gamma_0(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)+\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\Gamma_0(\mathbf{p},\mathbf{k},P)$$
$$\times\left[\frac{N(\mathbf{P},\mathbf{k})}{\epsilon-k^2+i\eta N(\mathbf{P},\mathbf{k})}-\frac{1}{\epsilon-k^2+i\eta}\right]$$

$$\times \frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\mathbf{k},\mathbf{p}',P). \qquad (11.48)$$

既然方程(11.45)和(11.48)是用自由散射振幅表示的，我们可以过渡到无限大刚性核势（$V_0 \to \infty$）的极限．然而，如前面已注意到的，$\tilde{f}(\mathbf{p},\mathbf{p}')$必须对一切$\mathbf{p}$和$\mathbf{p}'$值（不在能量壳层上的）都是已知的，而却只能在能量壳层上测量出来．粗略地说，Γ_0这个量[方程(11.45)]包含不在能量壳层上的散射效应，而作为Γ的积分方程，即方程(11.48)，则在中间态体现了不相容原理．我们称这些方程为 Galitskii 积分方程[1]．(这些方程是他与 Beliaev[2] 共同推得的，Beliaev 当时正研究非理想 Bose 气体中的类似问题。)

正规自能

对于低密度 Fermi 气体，方程(11.48)可用迭代法求解，得到$k_F a \ll 1$的幂级数．这个展开式之所以可能，是因为当矢量$\frac{1}{2}\mathbf{P}\pm\mathbf{k}$两者都在 Fermi 海之外时，被积函数为零；既然我们关心的是数量级为ε_F的能量，方程(11.48)的末项可估计为$\Gamma_0 k_F m\Gamma/\hbar^2$(可能相差一个数字因子)．这给出改正项的数量级为$(\Gamma-\Gamma_0)/\Gamma \approx k_F m\Gamma_0/\hbar^2 \approx k_F\tilde{f} \approx k_F a \ll 1$，这里用到了方程(11.46)和(11.22)．

在仔细展开方程(11.48)之前，我们注意到在任何计算中，从不需要$(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)$这整个一组变量．的确，所需要的就只是正规自能[方程(11.28)]：

$$\hbar\Sigma^*(p) = -2i(2\pi)^{-4}\int d^4k G^0(k)\Gamma(pk;pk) + i(2\pi)^{-4}$$

---

1) V. M. Galitskii 前引文.
2) S. T. Beliaev, *Sov. Phys-JETP*, **7**:299(1958).

$$\times \int d^4k G^0(k)\Gamma(kp; pk). \tag{11.49}$$

定义相对波矢、总波矢和频率如下：

$$\frac{1}{2}(\mathbf{p}-\mathbf{k})=\mathbf{q},\quad \mathbf{p}+\mathbf{k}=\mathbf{P},\quad p_0+k_0=P_0. \tag{11.50}$$

既然 Γ 只与方程(11.40)中所示的那些变量有关，正规自能可改写为

$$\hbar\Sigma^{\star}(p) = -2i(2\pi)^{-4}\int d^4k G^0(k)\Gamma(\mathbf{q},\mathbf{q},P)$$

$$+ i(2\pi)^{-4}\int d^4k G^0(k)\Gamma(-\mathbf{q},\mathbf{q},P). \tag{11.51}$$

我们现在展开 Γ 到 k_Fa 的第二级. 根据 s 波散射长度的定义，s 波相移的长波展开式是

$$\delta_0 \approx -ka + O[(ka)^3].$$

此外，第 l 分波的首项由 $\delta_l \approx O[(ka)^{2l+1}]$ 给出. 这样，散射振幅具有极限值

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{k}e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \\ &= k^{-1}(1+i\delta_0)\delta_0 + O(k^2a^3) \\ &= -a + ika^2 + O(k^2a^3) \\ &\qquad (|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| \to 0). \end{aligned} \tag{11.52}$$

值得注意的是，这个长波极限仅仅依赖于 s 波的散射长度；对于刚球气体，a 正是球的直径，不过方程(11.52)显然是更为一般的. 特定地说，随着 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}'$ 趋于零，散射振幅总是化为一个常数，在长波极限下，这使我们可取不在能量壳层上的 $f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ 的首项贡献. 方程(11.52)的第二项是纯虚数，这就保证，到 a^2 的数量级，满足推广的幺正性方程(11.19). 到这个数量级，相应的振幅 $\tilde{f}$ [方程(11 12)]成为

$$\tilde{f} \approx 4\pi a - 4\pi i a^2 k \quad (|k| = |k'| \to 0). \tag{11.53}$$

如在本节开头所注意到的，非理想 Fermi 气体的展开参数是 $k_F a$，只要密度很低 ($k_F \to 0$)或散射长度很小($a \to 0$)，参数 $k_F a$ 就是小量. 在这个极限下，Galitskii 方程可用于计算介质中的散射振幅 $\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P)$ 到 $(k_F a)^2$ 的数量级. 方程 (11.45) 和 (11.53) 一起给出

$$\begin{aligned}
&\frac{m}{\hbar^2}\Gamma_0(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) \\
&\quad = 4\pi a - 4\pi i q a^2 + 4\pi a^2 \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \\
&\qquad \times \left(\frac{1}{\varepsilon - k'^2 + i\eta} + \frac{1}{k'^2 - q^2 - i\eta} \right) + \cdots \\
&\quad = 4\pi a + (4\pi a)^2 \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \\
&\qquad \times \left(\frac{1}{\varepsilon - k'^2 + i\eta} + \frac{\mathscr{P}}{k'^2 - q^2} \right) + \cdots,
\end{aligned}$$

其中 $\mathscr{P}$ 表示主值，而虚部与 $-4\pi i q a^2$ 项抵消. 这个到 a^2 数量级的展开式，现在与方程 (11.48) 相结合，得出

$$\begin{aligned}
\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) = 4\pi a + (4\pi a)^2 \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \\
\times \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')}{\varepsilon - k'^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')} \right. \\
\left. + \frac{\mathscr{P}}{k'^2 - q^2} \right] + \cdots, \qquad (11.54)
\end{aligned}$$

因为被积函数中含有 $(\varepsilon - k'^2 + i\eta)^{-1}$ 的项恒相抵消. 注意方程(11.54)是用已知量表示 $\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P)$ 的显式；此外，容易看出，到 a^2 数量级，

$$\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) = \Gamma(-\mathbf{q}, \mathbf{q}, P). \qquad (11.55)$$

这样，方程 (11.51) 的第二项抵消了第一项的一半，我们得到

$$\hbar\Sigma^*(p) = -i(2\pi)^{-4} \int d^4k G^0(k)\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P), \qquad (11.56)$$

这到 a^2 数量级是正确的. 这种抵消是第 10 节所注意到的一般结果的典型代表，第 10 节曾说，对于短程势，直接项和交换项在大小上可相比拟.

方程 (11.54) 中的 Γ 展开式导致自能按 a 的幂展开的相应的式子

$$\hbar\Sigma^{\star}(p) = \hbar\Sigma^{\star}_{(1)}(p) + \hbar\Sigma^{\star}_{(2)}(p) + \cdots,$$

其中

$$\hbar\Sigma^{\star}_{(1)}(p) = -i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}G^0(k)\frac{4\pi a\hbar^2}{m}e^{ik_0\eta'},$$

$$\hbar\Sigma^{\star}_{(2)}(p) = -i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}G^0(k)e^{ik_0\eta'}(4\pi a)^2\frac{\hbar^2}{m}\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}$$
$$\times\left[\frac{N(\mathbf{P},\mathbf{k}')}{\epsilon - k'^2 + i\eta N(\mathbf{P},\mathbf{k}')} + \frac{\mathscr{P}}{k'^2 - q^2}\right],$$

这里下标表示 a 的幂次，而不是微扰论的级别. 把积分回路在上半平面加以闭合就容易算出第一项 [收敛因子 $e^{ik_0\eta'}$ 所起作用同在方程 (11.27) 中的一样]

$$\hbar\Sigma^{*}_{(1)}(p) = -i\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{4\pi a\hbar^2}{m}\int\frac{dk_0}{2\pi}e^{ik_0\eta'}$$
$$\times\left[\frac{\theta(k-k_F)}{k_0 - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{k_0 - \omega_k - i\eta}\right]$$
$$= \frac{4\pi a\hbar^2}{m}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\theta(k_F - k)$$
$$= \frac{\hbar^2k_F^2}{m}\frac{2k_Fa}{3\pi}. \tag{11.57}$$

第二项要复杂一些，因为频率 k_0 通过组合

$$\epsilon = mP_0/\hbar - \frac{1}{4}\mathbf{P}^2 = mp_0/\hbar + mk_0/\hbar - \frac{1}{4}\mathbf{P}^2$$

而出现于分母中. 正是这一依赖关系使得必须求解不在能量壳层上的 Γ. k_0 积分的计算非常类似于方程 (11.35) 中的计

算，我们求得

$$\hbar\Sigma^{\star}_{(2)}(\mathbf{P},P_0)=\frac{\hbar^2}{m}16\pi^2a^2\int\frac{d^3k\,d^3k'}{(2\pi)^6}$$

$$\times\left[\frac{\theta(k_F-k)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{k}'\right|-k_F\right)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{k}'\right|-k_F\right)}{mp_0/\hbar-\frac{1}{2}p^2+q^2-k'^2+i\eta}\right.$$

$$+\frac{\theta(k-k_F)\theta\left(k_F-\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{k}'\right|\right)\theta\left(k_F-\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{k}'\right|\right)}{mp_0/\hbar-\frac{1}{2}p^2+q^2-k'^2-i\eta}$$

$$\left.-\frac{\mathscr{P}\theta(k_F-k)}{q^2-k'^2}\right],\qquad(11.58)$$

上式已用下列写法作了简化［比较方程(11.50)］

$$\frac{\hbar k^2}{2m}-\frac{\hbar P^2}{4m}=\frac{\hbar q^2}{m}-\frac{\hbar^2p^2}{2m}.$$

方程(11.57)和(11.58)在一起把 $\Sigma^{\star}$ 表为级数，包含了数量级为 $(k_Fa)^2$ 的一切项.

稀薄 Fermi 气体的单粒子 Green 函数现在取近似形式

$$G(\mathbf{p},p_0)\approx\left[p_0-\frac{\hbar p^2}{2m}-\Sigma^{\star}_{(1)}(\mathbf{p},p_0)-\Sigma^{\star}_{(2)}(\mathbf{p},p_0)\right]^{-1},\qquad(11.59)$$

而激发谱 $p_0=\hbar^{-1}\varepsilon_{\mathbf{p}}+i\gamma_{\mathbf{p}}$ 由下列方程的解确定

$$p_0-\frac{\hbar p^2}{2m}-\Sigma^{\star}_{(1)}(\mathbf{p},p_0)-\Sigma^{\star}_{(2)}(\mathbf{p},p_0)=0.\qquad(11.60)$$

既然 $\Sigma^{\star}_{(1)}$ 是 k_Fa 数量级的常数，谱必然具有下列展开式

$$p_0=\frac{\hbar p^2}{2m}[1+O(k_Fa)].\qquad(11.61)$$

因此在方程(11.60)的末项中可令 $p_0\approx\hbar p^2/2m$，因这项已

经是 $(k_Fa)^2$ 的数量级；这是一个重要的简化，于是显式解成为

$$\begin{aligned}
&\epsilon_{\mathbf{p}} + i\hbar\gamma_{\mathbf{p}} \\
&= \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \hbar\Sigma^{\star}_{(1)} + \hbar\Sigma^{\star}_{(2)}(\mathbf{p}, \omega_{\mathbf{p}}) \\
&= \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_F^2}{m}\left\{\frac{2}{3\pi}k_Fa + 16\pi^2(k_Fa)^2\int\frac{d^3k\,d^3k'}{(2\pi)^6}\right. \\
&\quad\times\left[\frac{\theta(1-k)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{k}'\right|-1\right)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{k}'\right|-1\right)}{q^2-k'^2+i\eta}\right. \\
&\quad+\frac{\theta(k-1)\theta\left(1-\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{k}'\right|\right)\theta\left(1-\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{k}'\right|\right)}{q^2-k'^2-i\eta} \\
&\quad\left.\left.-\frac{\mathscr{P}\theta(1-k)}{q^2-k'^2}\right]+O(k_F^3a^3)\right\} \\
&\qquad\left(\mathbf{P}=\mathbf{p}+\mathbf{k},\quad \mathbf{q}=\frac{1}{2}(\mathbf{p}-\mathbf{k})\right), \quad (11.62)
\end{aligned}$$

这里所有的波矢都用 k_F 表出，使积分成为无量纲的.

这个方程好象是对于粒子间的势为 $4\pi\hbar^2a/m$，在动量空间中用不含时间微扰得到的第二级展开式，选用这个势，是为了再现正确的 s 波散射振幅的. 花括号中的量正比于正规自能，其物理解释示意于图 11.9. (现在把这些理解为不含时间微扰论的图解，可与 Goldstone 图解作类比. 走向向上的箭头表示粒子，走向向下的箭头表示空穴.) 方程 (11.62) 和图 11.9 a 的 k_Fa 数量级的项表示被介质中其它粒子向前散射，其有效势为 $4\pi\hbar^2a/m$. 方程 (11.62) 的第二级改正体现了介质对于中间态的影响. 关于后面这些项，前两个代表图 11.9 b 和 11.9 c 所示的过程，而最后一项 $[\mathscr{P}(q^2-k'^2)^{-1}]$ 则必须减掉，因为假如没有填满的 Fermi 海作为背景，则到同一数量

级，准确的散射振幅的实部将是 $-a$. 图 11.9b 和图 11.9c 中的项表示如下的物理过程. 在前一种情况中，入射粒子与介质

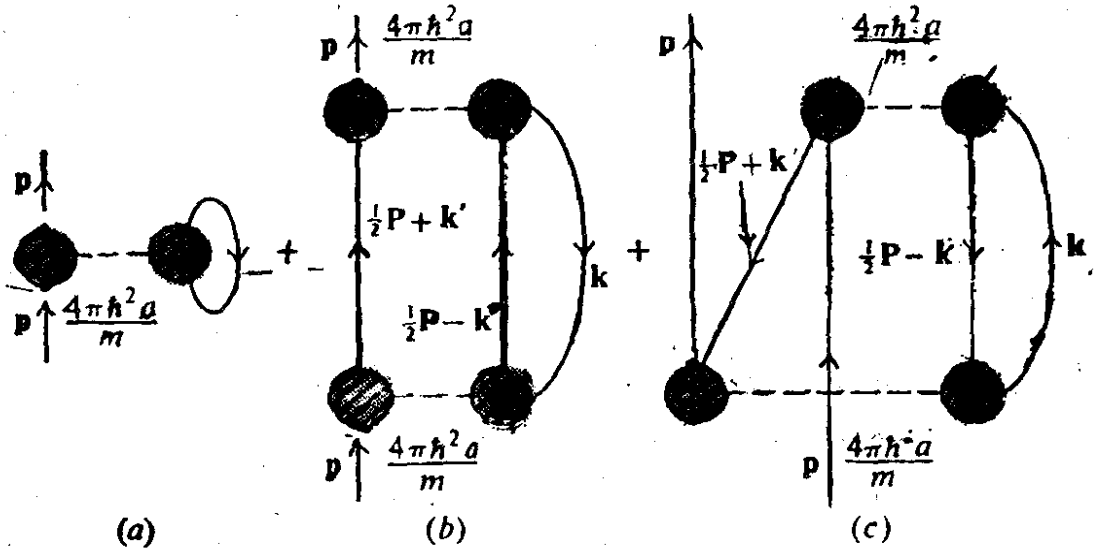


图 11.9 正规自能的示意图解展开式.

中的一个粒子碰撞，激发它到 Fermi 海上方某一个态，因而在介质中留下一个空穴；然后这两个粒子再一次碰撞，使系统回复到 Fermi 海和一个入射粒子的初始状态. 第二种情况是一种交换过程. 介质中的两个粒子相互作用；两者都激发到 Fermi 海以上的能态，因而在介质里留下两个空穴. 入射粒子和激发粒子中的一个碰撞，然后这两个粒子填充两个空穴. 这样，系统回复到它的初始状态，仅有的改变是原来的入射粒子与激发粒子中的一个作了交换.

物理量

现在我们考察方程 (11.62) 的意义：

1. *单粒子激发的寿命*：显然，对于波矢为 **p** 的粒子，实部 ε_p 包含了单粒子能量的移动，而虚部 γ_p 则导致有限的寿命 [比较方程 (7.79)]. 完成方程 (11.62) 的积分，我们求得[1]

1) V. M. Galitskii, 前引文.

$$\hbar\gamma_p = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\frac{2}{\pi}(k_F a)^2\left(\frac{k_F - p}{k_F}\right)^2 \mathrm{sgn}(k_F - p), \quad (11.63)$$

上式在 $|p \cdots k_F| \ll k_F$ 时成立. 按照一般的 Lehmann 表示(图 7.1), 对于 $p > k_F (p < k_F)$, 极点位于实轴下面(上面). 既然 γ_p 按照 $(p - k_F)^2$ 趋于零, 因而当 $p \to k_F$, 寿命成为无限长, 而且条件 $\varepsilon_p - \mu \gg \hbar\gamma_p$ 得以满足 [比较导致方程 (7.79) 的讨论].[1] 这些长寿的单粒子激发通常称作准粒子. 注意 γ_p 正比于 $(ka)^2$, 这是因为有限的寿命反映真实跃迁的可能性, 因而牵涉 $|f|^2 \propto a^2$.

2. 单粒子激发谱: 从这里的准粒子近似

$$G(\mathbf{p}, p_0) \approx (p_0 - \varepsilon_p \hbar^{-1} - i\gamma_p)^{-1}, \quad (11.64)$$

可推出, 基态仍然是直到波矢为 k_F 都填满的 Fermi 海[2], 但是有不同的色散关系 ε_p. 既然 γ_p 在 k_F 处变号, Lehmann 表示指明化学势由 $\mu = \varepsilon_F$ 给出. 因此必须计算在 Fermi 面上的 ε_p. 对方程 (11.62) 进行的冗长的积分计算给出

$$\mu = \varepsilon_{k_F} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\left[1 + \frac{4}{3\pi}k_F a + \frac{4}{15\pi^2}(11 - 2\ln 2)(k_F a)^2\right], \quad (11.65)$$

这首先为 Galitskii 得到.

靠近 Fermi 面, 能谱可展开为 Taylor 级数

$$\varepsilon_p = \varepsilon_{k_F} + \left.\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p}\right|_{k_F}(p - k_F) + \cdots$$

$$\equiv G_{k_F} + \frac{\hbar^2 k_F}{m^*}(p - k_F) + \cdots, \quad (11.66)$$

这里用 Fermi 面上的 ε_p 的斜率定义有效质量

1) 这里详叙的结果典型地代表了 J. M. Luttinger 的一般定理 [*Phys. Rev.* **121**:942 (1961)] 即 $\mathrm{Im}\Sigma^{\star}$ 在 Fermi 面附近按 $(\omega - \mu/\hbar)^2$ 趋于零, 这在微扰论中的任何一级都成立.

2) 基于方程 (11.59) 的更仔细的计算表明: 分布函数 n_p 稍有改变, 但它不影响下面的结果 [V. A. Belyakov, *Sov. Phys-JETP*, **13**: 850 (1961)]

$$m^* = \hbar^2 k_F \left(\frac{\partial \epsilon_p}{\partial p} \bigg|_{k_F} \right)^{-1}. \tag{11.67}$$

用方程 (11.62) 细致计算给出，

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{8}{15\pi^2}(7\ln 2 - 1)(k_F a)^2, \tag{11.68}$$

准确到 $(k_F a)^2$ 数量级. 注意方程 (11.68) 有下列特点:

(a) m^* 没有 $k_F a$ 的线性项，它反映了方程 (11.57) 中的 $\Sigma^*_{(1)}$ 常数数值.

(b) m^* 决定了零温度极限下的系统的热容量，因为热容量取决于 Fermi 面附近的态密度，因而也取决于有效质量. 如第 29 节将证明的，精确的关系由下式给出 [比较方程 (5.60)]

$$\frac{C_v}{v} \approx \frac{k_B^2 T m^* k_F}{3\hbar^2} \quad (T \to 0), \tag{11.69}$$

而方程 (11.68) 表明相互作用提高了 C_v. 虽然现在的模型只适用于 $ka \ll 1$，有意思的是，对纯 He^3 作的实验[1] 提示 $(m^*/m)_{He^3} \approx 2.9$，定性地符合于方程 (11.68). 不幸的是，$ka$ 数值很大，这就使简单的微扰展开不能用了，而需要比较精致的技巧[2].

3. 基态能量: 如 Galitskii 所指出，基态能量容易用热力学恒等式得到. 当然，用方程 (9.36) 可以从 $\Sigma^*(\mathbf{p}, p_0)$ 直接算出，但是下面的方法简单得多. 按定义，$S = 0$ 的化学势按照方程 (4.3) 与基态能量相联系

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_V \qquad (S = 0). \tag{11.70}$$

在不变的 V (而 $S = 0$)，把方程 (11.70) 积分，

---

1) 这个杰出的测量见 J. Wilks "The Properties of Liquid and Solid Helium" Ch. 17, Oxford University Press, (1967).

2) 例如见 L. D. Landau, *Sov. Phys-JETP*, **3**: 920 (1957).

$$E = \int_0^N dN' \mu(S = 0, V, N') \quad (V \text{ 常数}, S = 0).$$

既然N只是通过 $k_F = (3\pi^2 N/V)^{\frac{1}{3}}$ 出现于方程(11.65)中，这积分容易用关系式

$$\int_0^N dN' [k_F(N')]^\lambda = \frac{3}{3+\lambda} k_F^\lambda N$$

算出，我们求得

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\left[\frac{3}{5} + \frac{2}{3\pi}k_F a + \frac{4}{35\pi^2}(11 - 2\ln 2) \times (k_F a)^2 + 0.23(k_F a)^3 + \cdots\right]. \tag{11.71}$$

第一项是熟悉的自由 Fermi 气体的动能[方程 (3.30)]，而第二项在方程 (11.26) 的下面讨论过. 第三项来自不相容原理对中间态的修改，它首先由黄克逊和扬振宁得到[1]. 最后一项，在这里还未讨论过，它是由 DeDominicis 和 Martin 得到的.[2] 这需要研究三粒子的相关性，而且还依赖于 s 波的有效力程和 p 波散射长度上的势的精确形状. 如这里所写出的，方程(11.71)描写具有两个自由度的刚性球的 Fermi 气体；而对核物质(四个自由度，中子和质子，自旋向上和自旋向下)的相应表达式是

$$\left.\frac{E}{N}\right|_{\text{核物质}} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\left[\frac{3}{5} + \frac{2}{\pi}k_F a + \frac{12}{35\pi^2}(11 - 2\ln 2) \times (k_F a)^2 + 0.78(k_F a)^3 + \cdots\right]. \tag{11.72}$$

---

1) K. Huang 和 C. N. Yang, *Phys. Rev.*, **105**: 767 (1957); T. D. Lee 和 C. N. Yang *Phys, Rev.* **105**:1119(1957).

2) 严格说，C. DeDominicis 和 P. C. Martin [*Phys. Rev.* **105**: 1417 (1957)] 是对核物质得到 $(k_F a)^3$ 改正[方程 (11.72)]，而一般表示式是后来由 V. N. Efimov 和 M. Ya Amusya 推得的，*Sov. Phys-JETP*, **20**: 388 (1965).

保留各有关项的理由

现在我们进一步证明我们的基本近似是合理的，这基本近似只保留图 11.3 表示的自能，在这图中两个粒子或两个空穴重复地相互作用.这些项中的一个示于图 11.10 a，与它在一起的是一个典型的被略去的项（图 11.10 b）. 基本的要点是，

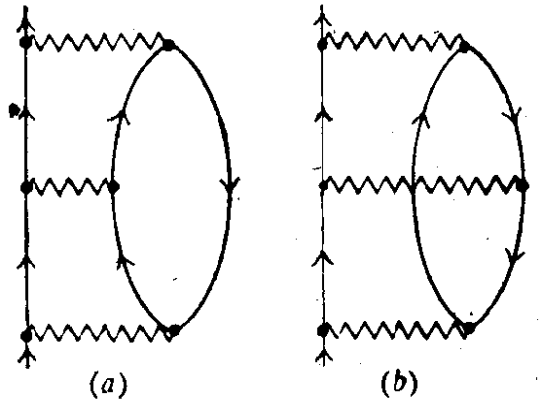


图 11.10　梯形近似中（a）保留的和（b）略去的图解的比较.

图 11.10 a 中只有一根线是反向的，而在图 11.10 b 中则有两根线反向. 为了精确地说明线的方向的影响，我们考虑各自图形中的两个部份，如图 11.11 所示［比较方程（11.27）下面的讨论］. 对 q 的相应积分分别为

$$i\hbar^{-1}(2\pi)^{-4}\int d^4qU_0(q)G^0(p_1+q)G^0(p_2-q), \quad (11.73a)$$

$$i\hbar^{-1}(2\pi)^{-4}\int d^4qU_0(q)G^0(p_1+q)G^0(p_2+q). \quad (11.73b)$$

在情况（a），两个 Green 函数所含的 q 反号，而在情况（b）中，它们同号. 这个差别对于频率积分具有关键影响，只要完成对 q_0 的积分就容易验证这一点. 具体讲，方程（11.73 a）含有因子为 $(1-n^0_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}})(1-n^0_{\mathbf{p}_2-\mathbf{q}})$ 和 $n^0_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}}n^0_{\mathbf{p}_2-\mathbf{q}}$ 的两项，而在方程（11.73 b）中相应的项含有因子 $(1-n^0_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}})n^0_{\mathbf{p}_2+\mathbf{q}}$ 以

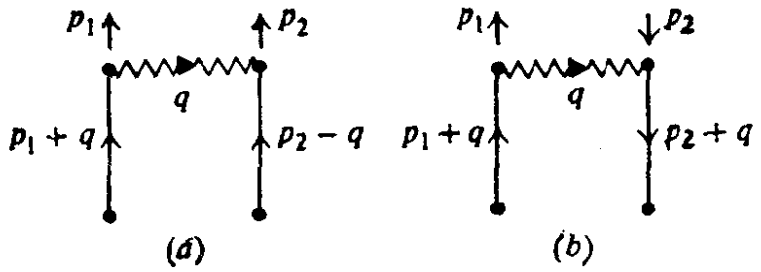


图 11.11 梯形近似中 (a) 保留的和 (b) 略去的图形的部份.

及 $n^0_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}}(1-n^0_{\mathbf{p}_2+\mathbf{q}})$ [比较导致方程 (11.35) 的计算]. 对于现在的低密度系统，在 Fermi 海内的动量积分是在有限的相空间进行，因为 $k_F\propto(N/V)^{\frac{1}{3}}$ 是很小的，而在 Fermi 海外的动量积分实质上没有限制. 这样，因子 n^0 的出现 (一个空穴) 使相应的项比起只含粒子的项减小了. 这个计算明显地说明在图 11.3 和图 11.4 的讨论中粒子和空穴的区别.

有意思的问题是，现在的理论可以怎样改进. 它最明显的缺点是，缺乏自洽性，因为 Σ^* 用自由的 Green 函数 G^0 算出，却用以决定具有全部相互作用的 G. 可以使计算成为自洽的 (在第 10 节的意义上)，办法是，把方程 (11.28) 和 (11.30) 中所有的因子 G^0 都改换成 G; 实际上，这把出现在方程(11.58)中的自由粒子能量 $\epsilon^0_k=\hbar^2k^2/2m$ 改为相互作用能 ϵ_k，并且带来附加的对频率的依赖性. 于是，在这方法里，Σ^* 取决于准确的单粒子能量，而这能量反过来又取决于 Σ^*. 这个修订了的理论非常类似于 Brueckner 关于核物质和 He^3 的理论[1]，虽然在细节上有所不同. 这些问题将在第十一章进一步讨论.[2]

---

1) K. A. Brueckner, 前引文.

2) 也可参阅 A. L. Fetter and K. M. Watson, "The Optical Model", sec. V and VI, 见于 K. A. Brueckner (ed.), "Advances in Theoretical Physics", vol. I. p. 115, Academic Press, Inc.,New York,1965.

12. 简并电子气体

作为本章最后一个例子，我们回到第 3 节处理过的简并（高密度）电子气体. 最直接的方法是分析正规自能中较高级的项；正如在第 11 节中一样，占支配地位的贡献来自特殊的一类图解，它们可以求和. 第 30 节将详细地研究这一步骤，那里考虑的是在有限温度下的电子气体. 这里我们变化一下，描述另一种表述，在这种表述中，基态能量是用极化插入图形 Π 和广义介电常数表出的.

基态能量和介电常数

为简化我们的处理，本节限于空间均匀的粒子系统，而势是与自旋无关的静态势，

$$V(\mathbf{x},\mathbf{x}')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} = V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}, \tag{12.1a}$$

$$\begin{aligned} U_0(x,x')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} &= U_0(x-x')\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'} \\ &= V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(t-t')\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}. \end{aligned} \tag{12.1b}$$

于是玻色子和费米子两者的相互作用能[方程 (7.11)]都化为

$$\begin{aligned} \langle\hat{V}\rangle &= \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\ &\quad \times \langle\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}')\psi_\beta(\mathbf{x}')\psi_\alpha(\mathbf{x})\rangle \\ &= \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\ &\quad \times [\langle\hat{n}(\mathbf{x})\hat{n}(\mathbf{x}')\rangle - \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle], \end{aligned} \tag{12.2}$$

这里的第三、四行已用正则的对易或反对易关系式[方程(2.3)]作了改写，尖括号表示基态的期待值. 引入密度偏差算符

$$\tilde{n}(\mathbf{x}) \equiv \hat{n}(\mathbf{x}) - \langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle, \tag{12.3}$$

将是方便的，这时方程 (12.2) 成为

$$\langle\hat{V}\rangle = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')[\langle\tilde{n}(\mathbf{x})\tilde{n}(\mathbf{x}')\rangle$$

$$+\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle\langle\hat{n}(\mathbf{x}')\rangle - \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle]. \quad (12.4)$$

这个方程描写任意的相互作用系统，因而是很复杂的．但是它的真正用途在于均匀系统，对于均匀系统 $\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle$ 是常数并等于 $n = N/V$．于是方程 (12.4) 的末两项是平凡的，我们可以集中讨论密度相关函数 $\langle\tilde{n}(\mathbf{x})\tilde{n}(\mathbf{x}')\rangle$，它包含了一切有意思的物理效应．

为利用第三章的图解分析，我们引入编时相关函数

$$iD(x,x') = \frac{\langle\Psi_0|T[\tilde{n}_H(x)\tilde{n}_H(x')]|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}, \quad (12.5)$$

它显然对其宗量对称：

$$D(x,x') = D(x',x). \quad (12.6)$$

由于以后的讨论中将会弄清楚的理由，D 常常称为极化传播函数．在介质均匀且 $\hat{H}$ 与时间无关的通常情况下，D 只依赖于 $x-x'$．相互作用能[方程 (12.4)] 现在可改写为

$$\langle\hat{V}\rangle = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')[iD(\mathbf{x}'t,\mathbf{x}t)$$

$$+n^2 - \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')n], \quad (12.7)$$

这里因为 D 是对称的，我们可直接置 $t = t'$．如果 D^0 表示无相互作用系统的相应的相关函数

$$iD^0(x',x) = \langle\Phi_0|T[\tilde{n}_I(x')\tilde{n}_I(x)]|\Phi_0\rangle, \quad (12.8)$$

则相互作用能可划分成第一级贡献和一切高级贡献

$$\langle\hat{V}\rangle = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')[iD^0(\mathbf{x}'t,\mathbf{x}t) + n^2$$

$$-\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')n] + \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\times[iD(\mathbf{x}'t,xt) - iD^0(\mathbf{x}'t,\mathbf{x}t)], \quad (12.9\,a)$$

$$\langle\hat{V}\rangle = \langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle + \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \times [iD(\mathbf{x}'t,\mathbf{x}t) - iD^0(\mathbf{x}'t,\mathbf{x}t)]. \quad (12.9\,\mathrm{b})$$

这种划分是很方便的，因为我们已在第 3 节算出了第一项. 注意方程 (12.9 b) 只适用于均匀系统，其中 $\langle\tilde{n}(\mathbf{x})\rangle = N/V$ 是与粒子间的相互作用无关的. 在非均匀系统里，粒子间的势改变了粒子密度，因而 $\langle\tilde{n}(\mathbf{x})\rangle$ 含有微扰论中一切级的贡献. 一个简单例子是原子中的电子，那里库仑排斥力修改了未微扰的氢原子式的轨道.

方程 (12.9 b) 可与方程 (7.30) 结合，给出总的基态能量和第 3 节定义的相关能

$$E = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + \frac{1}{2}\int_0^1 d\lambda\lambda^{-1}\int d^3x d^3x' \lambda V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \times [iD^\lambda(\mathbf{x}'t,\mathbf{x}t) - iD^0(\mathbf{x}'t,\mathbf{x}t)] = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + E_{\text{相关}}, \quad (12.10)$$

这里可变耦合参数 λ 的积分已在第一级中算出. 对于这里的均匀系统，这表示式在动量空间要简单得多；在动量空间中，我们求得

$$E_{\text{相关}} = \frac{1}{2}V(2\pi)^{-4}\int_0^1 d\lambda\lambda^{-1}\int d^4q V(\mathbf{q}) \times [iD^\lambda(\mathbf{q},\omega) - iD^0(\mathbf{q},\omega)]. \quad (12.11)$$

这里 $V(\mathbf{q})$ 表示 $V(\mathbf{x})$ 的 Fourier 变换，而

$$D^\lambda(x,x') = D^\lambda(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t') = (2\pi)^{-4}\int d^4q e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}e^{-i\omega(t-t')}D^\lambda(\mathbf{q},\omega). \quad (12.12)$$

由于 $D(x,x')$ 是对称的 [方程 (12.6)]，我们可以写出方程 (12.11) 而不用收敛因子 $e^{\pm i\omega\eta}$，这就与方程 (7.32) 不同.

现在我们已经就任意数值的耦合常数用编时密度相关函数 D^λ 表示相互作用系统的基态能量. 作为对这个函数的引

导，算出无相互作用系统的 $D^0(x, x')$ 是有用的，

$$iD^0(x, x') = \langle \Phi_0 | T[\hat{\psi}_\alpha^\dagger(x)\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^\dagger(x')\hat{\psi}_\beta(x')] | \Phi_0 \rangle$$
$$- \langle \Phi_0 | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(x)\hat{\psi}_\alpha(x) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | \hat{\psi}_\beta^\dagger(x')\hat{\psi}_\beta(x') | \Phi_0 \rangle .$$

这表示式容易用 Wick 定理算出，

$$iD^0(x, x') = iG^0_{\alpha\alpha}(x, x^+)iG^0_{\beta\beta}(x', x'^+)$$
$$- iG^0_{\alpha\beta}(x, x')iG^0_{\beta\alpha}(x', x) - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle$$
$$= (2s + 1)G^0(x, x')G^0(x', x),$$

这里我们把讨论限于自旋为 s 的均匀 Fermi 系. 无相互作用 Green 函数的这个积具有图 12.1 a 所示的形式，这在极化插入

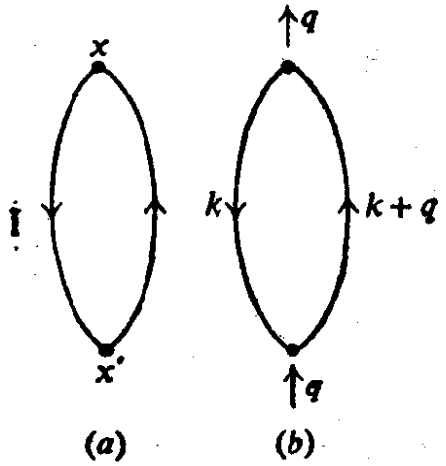


图 12.1 (a) 坐标空间中 (b) 动量空间中对密度相关函数的最低级贡献 D^0.

图形中是典型的. 诚然，对 $U(x, x')$ 的最低级贡献示于图 12.2，并可写为

$$U(x,x') = U_0(x, x') - i\hbar^{-1}\int d^4x_1 d^4x_1' U_0(x, x_1)G^0_{\alpha\beta}(x_1, x_1')$$
$$\times G^0_{\beta\alpha}(x_1', x_1)U_0(x_1', x') + \cdots$$
$$= U_0(x, x') + \int d^4x_1 d^4x_1' U_0(x, x_1)$$
$$\times \Pi^0(x_1x_1')U_0(x_1', x') + \cdots .$$

因此我们 [比较方程 (9.44)] 得出

$$D^0(x, x') = -iG^0_{\alpha\beta}(x, x')G^0_{\beta\alpha}(x', x)$$
$$= \hbar\Pi^0(x, x'). \tag{12.13}$$

容易验证，这样的结构将持续到任意一级，由此 $D(x, x')$ 是总的极化插入图形的 $\hbar$ 倍.

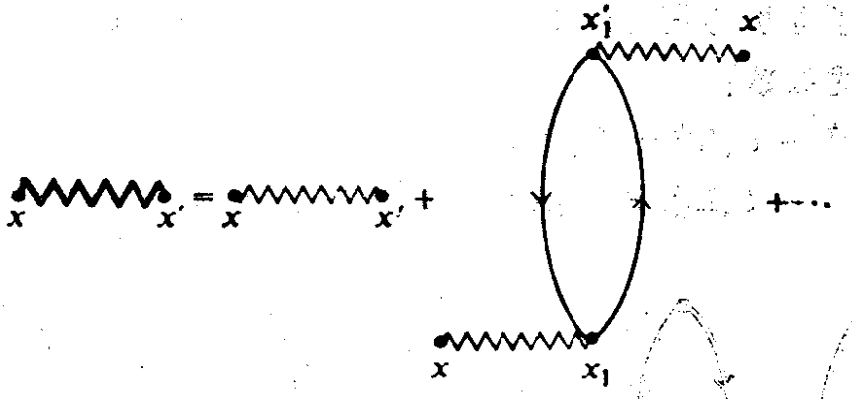
$$D(x, x') = \hbar\Pi(x, x') = \hbar\Pi(x', x). \tag{12.14}$$

此外，Dyson 方程使我们可以把 $\int d^4x_1 U_0(x, x_1)\Pi(x_1, x')$ 改写成 $\int d^4x_1 U(x, x_1)\Pi^\star(x_1, x')$，其中 $\Pi^\star$ 是正规极化. 动量空间中的相应的关系式由 $U_0(q)\Pi(q) = U(q)\Pi^\star(q)$ 给出，而相关能 [方程 (12.11)] 成为

$$E_{\text{相关}} = +\frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int_0^1 d\lambda\lambda^{-1}\int d^4q$$
$$\times [U^\lambda(q)\Pi^{\star\lambda}(q) - \lambda U_0(q)\Pi^0(q)]. \tag{12.15}$$

注意

$$\Pi^0(q) = \Pi^\star_{(0)}(q), \tag{12.16}$$


x'
x
x
x'
+
+···
x'
x
x
x

$$U(q)\Pi^{\star}(q) = \frac{U_0(q)\Pi^{\star}(q)}{1 - U_0(q)\Pi^{\star}(q)}$$

$$= \frac{1-\kappa(q)}{\kappa(q)} = \frac{1}{\kappa(q)} - 1, \qquad (12.17)$$

这给出

$$E_{\text{相关}} = +\frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int_0^1 d\lambda\lambda^{-1}\int d^4q$$

$$\times \{[\kappa^{\lambda}(q)]^{-1} - 1 - \lambda U_0(q)\Pi^0(q)\}. \qquad (12.18)$$

环形图解

方程(12.15)对任何均匀系都适用，现在我们把它专门用到方程(3.19)的哈密顿函数所描写的简并电子气体. 如第3节所示，均匀的正电背景精确地抵消了势中的$\mathbf{q} = 0$的项，因而$V(0)$恒等于零. 这反映了中性介质中没有向前的散射这个物理事实. 其结果，所有"蝌蚪"图解（图9.7 a，9.8 a，c，d等）从理论中消失，这相当地简化了微扰分析.

为了理解方程(12.15)的结构，我们暂且将$U\Pi^{\star}$展成如下的微扰级数:

$$U\Pi^{\star} = U_0\Pi^{\star} + U_0\Pi^{\star}U_0\Pi^{\star} + \cdots$$

$$= U_0\Pi^{\star}_{(0)} + U_0\Pi^{\star}_{(1)} + U_0\Pi^{\star}_{(0)}U_0\Pi^{\star}_{(0)} + \cdots,$$

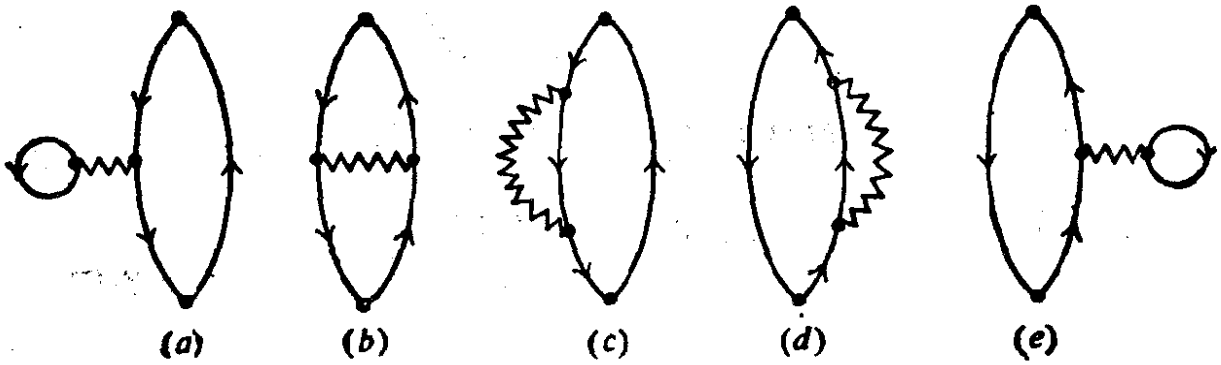


图 12.3 对正规极化的所有第一级贡献.

这里 $\Pi^*_{(0)}$ 由方程 (12.16) 给出，而 $\Pi^*_{(1)}$ 是第一级正规极化，其贡献示于图 12.3. 第一项和最后一项(图 12.3 a 和 e) 在这个例子 [$V(0) = 0$] 为零，而剩下中间三项. 相应地，相关能具有展开式

$$E_{\text{相关}} = E_2^a + E_2^b + E_2^c + E_2^d + \cdots, \tag{12.19}$$

其中各种第二级贡献由下列式子给出

$$E_2^a = \frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int_0^1 d\lambda\lambda^{-1}\int d^4q[\lambda U_0(q)\Pi^0(q)]^2, \tag{12.20}$$

$$E_2^{b,c,d} = \frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int_0^1 d\lambda\lambda^{-1}\int d^4q$$

$$\times [\lambda U_0(q)\Pi^*_{(1)b,c,d}(q)]. \tag{12.21}$$

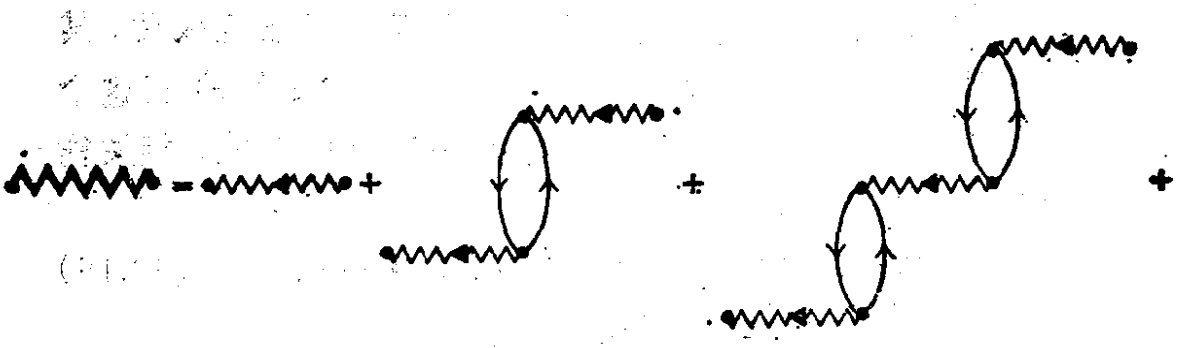
这里 $\Pi^*_{(1)b}$、$\Pi^*_{(1)c}$ 和 $\Pi^*_{(1)d}$ 表示图 12.3 b 到 d 的正规极化.

容易证明，方程(12.21)的贡献是有限的(习题 4.13). 相反地，E_2^a 对数式发散 (我们将在稍后的讨论中明显揭示这种发散性；也可见习题 1.5)，这里只到第二级的展开式显然是不够的. 这个发散性的来源是库仑势 $U_0(q) = V(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/\mathbf{q}^2$ 在长波的奇异性质；具体地说，E_2^a 有两个 $U_0(q)$ 的因子，导致 $(\mathbf{q})^{-4}$ 的行为. 类似的行为出现于一切级中，因为总是有单个第 n 级项，其被积函数是 $[U_0(q)\Pi^0(q)]^n$. 幸运的是，引入有效相互作用 $U_r(q)$ [比较方程 (9.45)] 就很容易包括微扰论中一切级的这些奇异项.

$$U_r(q) = U_0(q) + U_0(q)\Pi^0(q)U_0(q) + \cdots$$

$$= \frac{U_0(q)}{1 - \Pi^0(q)U_0(q)}, \tag{12.22}$$

这是介质中真实相互作用 $U(q)$ 的一个近似，它是在方程 (9.45) 中只保留零级正规极化 $\Pi^*_{(0)} = \Pi^0$ 而得到的. 方程 (12.22)包含图 12.4 所示各图解，并被称为环形图解的和. 由于历史的原因，它也被称为无规周相近似，虽然这个名字在这



$U_r = U_0 + \cdots$

图 12.4　有效相互作用的环近似.

里并不说明问题[1]. 选出的这类高级环形图解对基态能量作出如下贡献:

$$
\begin{aligned}
E_r &= \sum_{n=2}^{\infty} E_n^r \\
&= \frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4} \int_0^1 d\lambda \lambda^{-1} \int d^4q \sum_{n=2}^{\infty} [\lambda U_0(q)\Pi^0(q)]^n \\
&= \frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4} \int_0^1 d\lambda \lambda^{-1} \int d^4q \frac{[\lambda U_0(q)\Pi^0(q)]^2}{1 - \lambda U_0(q)\Pi^0(q)} \\
&= \frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4} \int_0^1 d\lambda \lambda^{-1} \int d^4q \lambda U_0(q)\Pi^0(q) U_r^{\lambda}(q)\Pi^0(q).
\end{aligned}
\tag{12.23}
$$

从最后一行看，E_r 的物理意义是清楚的，因为方程(12.20)中的一项“裸的”相互作用 $U_0(q)$ 已被(奇异性较低的)有效相互作用 $U_r(q)$ 所代替. 虽然 E_r 的第一项形式上是势的第二级项，在下面计算中我们将看到这个和式具有完全不同的解析结构，这是不可能在微扰论的任何有限级中得到的.

有效相互作用 $U_r(q)$ [方程(12.22)] 可按下列关系式[比较方程(9.46)和(9.47)] 用一个介电常数 $\kappa_r(q)$ 来改写

1) D. Bohm and D. Pines, *Phys. Rev.*, **92**: 609 (1953); D. Pines, *Phys. Rev.*, **92**: 626 (1953).

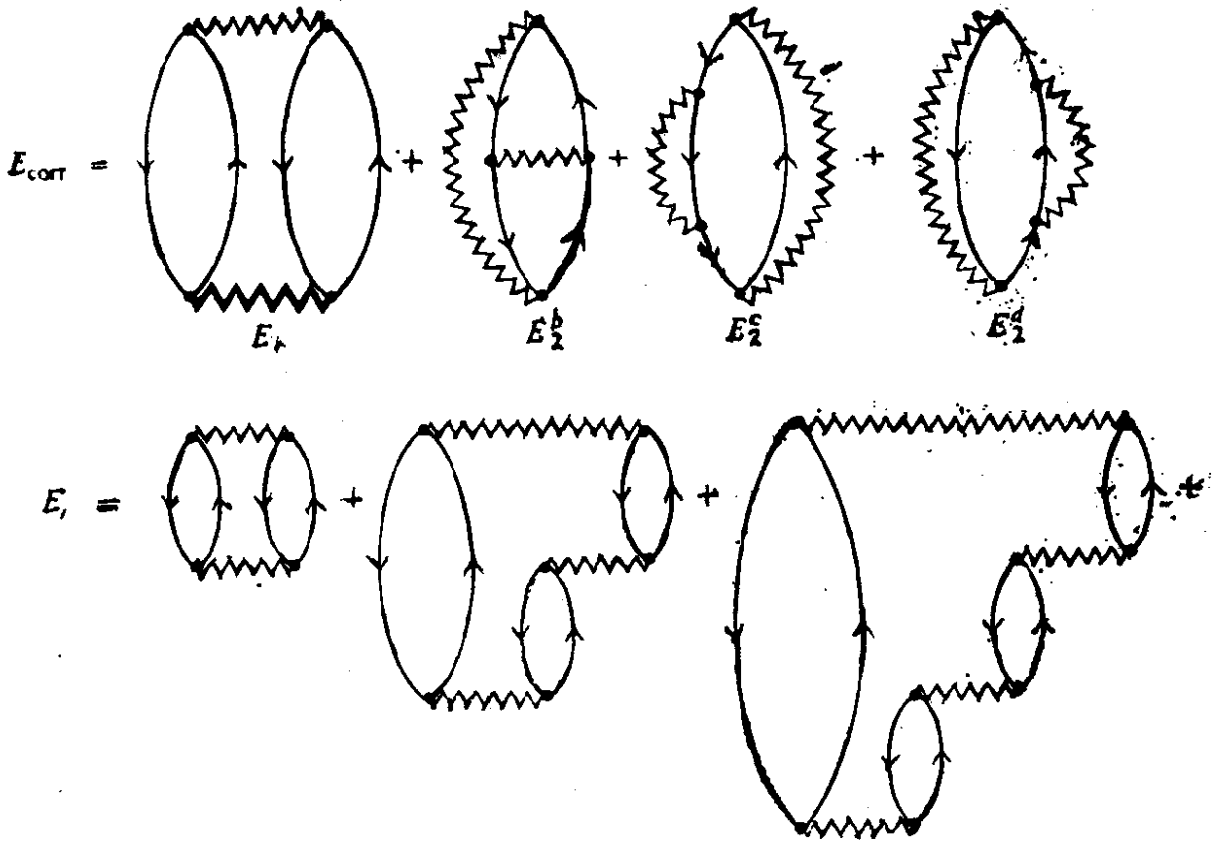


图 12.5　对相关能的头几个贡献.

$$\kappa_r(q) = 1 - U_0(q)\Pi^0(q) = \frac{U_0(q)}{U_r(q)}, \qquad (12.24)$$

这个 $\kappa_r(q)$ 可认为是准确介电常数的环形图解近似. 能量 E_r 于是成为

$$E_r = \frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int_0^1 d\lambda\lambda^{-1}\int d^4q \frac{[\lambda U_0(q)\Pi^0(q)]^2}{\kappa_r^\lambda(q)}. \qquad (12.25)$$

在现在的近似下，简并电子气体的相关能化为[1)]

$$E_{\text{相关}} = E_r + E_2^b + E_2^c + E_2^d + \cdots. \qquad (12.26)$$

在每一项中[比较方程 (12.20) 和 (12.21)]，极化插入图形的

1) 这些计算首先由 M.Gell-Mann 和 K. A. Brueckner 算得: *Phys. Rev.* **106**: 364 (1957). 我们这里根据 J. Hubbard 的方法，*Proc. Roy. Soc.* (*London*) **A2**13: 336 (1957); 也见T. D. Schultz "Quantum Field Theoryand Many-Body Problem" Sec. III. H. to Sec. III. J, Gordon 和 Breach, Science Publishers New York, 1964.

两端用裸的相互作用 $U_0(q)$ 联接，而对能量的贡献用等价的 Feynman 图解画出如图 12.5. 必须强调指出，这些不连接图解不能直接从第三章的 Feynmann 规则得到，因为独立贡献的计数不同于连接部份，如在图 12.5 中所显而易见（E_2^c 和 E_2^d 是同一个 Feynman 图解）. 引入 $E_{\text{相关}}$ 的图解分析虽然是可能的，但我们宁可只研究有固定外点的量，例如 Π、Σ、G 等等，因为单一的一组 Feynman 规则适用于所有情况. 这个限制并不带来什么困难，因为 E 容易用 Σ（见第 11 节）或 Π（见第 12 节）表出.

Π^0 的计算

为了进一步的详细分析，我们必须计算方程（12.13）所给出的最低级极化插入图形 Π^{0}[1]. 这个量不依赖于粒子间势，因此完全由无相互作用 Fermi 系统的性质所决定. 对于自旋为 1/2 的费米子，对 α 和 β 的求和给出因子 2，因此

$$\Pi^0(x, x') = -2i\hbar^{-1}G^0(x, x')G^0(x', x). \qquad (12.27)$$

这个表示式在动量空间计算最简单，Fourier 变换 $\Pi^0(q) \equiv \Pi^0(\mathbf{q}, q_0)$ 由下式给出

$$\Pi^0(q) = -2i\hbar^{-1}(2\pi)^{-4}\int d^4k G^0(k)G^0(q+k), \qquad (12.28)$$

或者对方程（12.27）进行计算或者把第 9 节中的 Feynman 规则应用于图 12.1 b，均可以验证上式.

作为第一步，进行方程(12.28)中的频率积分是方便的；被积函数包含四项，其中两项的极点在实轴的同一边. 对这两项，可把积分迴路在不含极点的那一个半平面上闭合起来，从而贡献为零. 另外两项的极点在实轴两边，直截了当的迴路

1) J. Lindhard, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat-Fys. Medd.*, **28**. *no.* 8 (1954).

积分给出

$$\Pi^0(q) = \frac{2}{(2\pi)^3\hbar}\int d^3k \times \left[\frac{\theta(|\mathbf{q}+\mathbf{k}| - k_F)\theta(k_F - k)}{q_0 + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} + i\eta} - \frac{\theta(k_F - |\mathbf{q}+\mathbf{k}|)\theta(k - k_F)}{q_0 + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} - i\eta}\right], \tag{12.29}$$

这里，像前面那样，$\omega_k = \hbar^{-1}\varepsilon_k^0 = \hbar k^2/2m$. 第二项可用变量变换 $\mathbf{k}' = -(\mathbf{k}+\mathbf{q})$ 来改写；这变换导致

$$\Pi^0(\mathbf{q}, q_0) = \frac{2}{\hbar}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\theta(|\mathbf{q}+\mathbf{k}| - k_F)\theta(k_F - k) \times \left(\frac{1}{q_0 + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} + i\eta} - \frac{1}{q_0 + \omega_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}} - i\eta}\right), \tag{12.30}$$

这里多余的撇号已去掉. 由观察可见，被积函数是 q_0 的偶函数，我们作出结论

$$\Pi^0(\mathbf{q}, q_0) \sim O(q_0^{-2}) \qquad (|q_0| \to \infty).$$

这种对称性使我们可以只研究正的 q_0.

如将分母中的频率差表示为

$$\omega_{\mathbf{qk}} \equiv \omega_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{2m}[(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2 - k^2] = \frac{\hbar}{m}\left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{k} + \frac{1}{2}q^2\right), \tag{12.31}$$

则符号恒等式 (7.69) 立即给出

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, q_0) = \frac{2\mathscr{P}}{\hbar}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}[1 - \theta(k_F - |\mathbf{k}+\mathbf{q}|)] \times \theta(k_F - k)\frac{2\omega_{\mathbf{qk}}}{q_0^2 - (\omega_{\mathbf{qk}})^2}, \tag{12.32}$$

这里第一个阶跃函数已用关系式

$$\theta(x) = 1 - \theta(-x) \tag{12.33}$$

加以改写. 方程(12.32)的第二项恒为零,因为阶跃函数的积在互换 $\mathbf{k} \rightleftarrows \mathbf{k} + \mathbf{q}$ 下是偶的,而 $\omega_{\mathbf{qk}}$ 是奇的;因此, $\mathrm{Re}\Pi^0$ 归结为

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, q_0) = \frac{2\mathscr{P}}{\hbar}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\theta(k_F - k) \times \left[\frac{1}{q_0 - \hbar m^{-1}\left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{k} + \frac{1}{2}q^2\right)} - \frac{1}{q_0 + \hbar m^{-1}\left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{k} + \frac{1}{2}q^2\right)}\right]. \tag{12.34}$$

现在引入无量纲频率变量

$$\nu = \hbar q_0 \frac{m}{\hbar^2 k_F^2} \tag{12.35}$$

并且所有波矢都用 k_F 来量度. 用这些无量纲变量,方程(12.34)成为

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, \nu) = \frac{2mk_F}{\hbar^2}\mathscr{P}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\theta(1-k) \times \left(\frac{1}{\nu - qk\cos\theta - \frac{1}{2}q^2} - \frac{1}{\nu + qk\cos\theta + \frac{1}{2}q^2}\right).$$

这是初等的积分,它给出

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\mathbf{q},\nu) = \frac{2mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi^2}\left\{-1 + \frac{1}{2q}\left[1 - \left(\frac{\nu}{q} - \frac{q}{2}\right)^2\right] \times \ln\left|\frac{1 + \left(\nu/q - \frac{1}{2}q\right)}{1 - \left(\nu/q - \frac{1}{2}q\right)}\right|\right.$$

$$-\frac{1}{2q}\left[1-\left(\frac{\nu}{q}+\frac{q}{2}\right)^2\right]$$

$$\times \ln\left|\frac{1+\left(\nu/q+\frac{1}{2}q\right)}{1-\left(\nu/q+\frac{1}{2}q\right)}\right|\Bigg\}. \qquad (12.36)$$

Π^0 的虚部也可用方程 (12.30) 和 (7.69) 算出，

$$\mathrm{Im}\Pi^0(\mathbf{q}, q_0) = -\hbar^{-1}(2\pi)^{-2}\int d^3k\theta(|\mathbf{q}+\mathbf{k}|-k_F)\theta(k_F-k)$$

$$\times [\delta(q_0-\omega_{\mathbf{qk}})+\delta(q_0+\omega_{\mathbf{qk}})]. \qquad (12.37)$$

这里再次只要考虑 $q_0>0$ 就够了，而且那一对阶跃函数保证了 $\omega_{\mathbf{qk}}$ 也是正的. 我们注意到 $\mathrm{Im}\,\Pi^0(\mathbf{q}, q_0)$ 有直接的物理解释，因为它正比于把四维动量 $(\mathbf{q}, q_0)$ 转移给自由 Fermi 气体的吸收几率；这过程把一个粒子从 Fermi 海内 $(k<k_F)$ 移到 Fermi 海外 $(|\mathbf{k}+\mathbf{q}|>k_F)$，而 δ 函数保证了能量守恒. Π^0 的这一应用将在第 17 节详尽地讨论.

就用方程 (12.36) 中的那些无量纲变量，借助恒等式

$$\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x), \qquad (12.38)$$

可以改写方程 (12.37) 中唯一的一个有关系的 δ 函数

$$\delta(q_0-\omega_{\mathbf{qk}}) = \frac{m}{\hbar k_F^2}\,\delta\left(\nu-\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}-\frac{1}{2}q^2\right),$$

因此我们需要计算

$$\mathrm{Im}\Pi^0(\mathbf{q}, \nu>0) = -mk_F(2\pi\hbar)^{-2}$$

$$\times\int d^3k\theta(|\mathbf{q}+\mathbf{k}|-1)\theta(1-k)$$

$$\times\,\delta\left(\nu-\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}-\frac{1}{2}q^2\right). \qquad (12.39)$$

积分限制在 Fermi 球内 $(k<1)$，同时矢量 $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ 必须在

Fermi 球外. 此外,能量守恒要求

$$\frac{1}{2}q+\hat{q}\cdot\mathbf{k}=\frac{\nu}{q},$$

这在三维 $\mathbf{k}$ 空间中规定了一个平面. 方程 (12.39) 的积分代表这平面与 Fermi 球的容许部份的截面积，如图 12.6 所示. 这里有三种不同的可能性:

$$1.\ q>2,\quad \frac{1}{2}q^2+q\geqslant\nu\geqslant\frac{1}{2}q^2-q. \tag{12.40}$$

如果 $q>2$，则图 12.6 中的两个 Fermi 球不相交,我们只需要这平面和上面一个球相交的截面积. 如果能量传递 ν 太大或太小，这面积显然为零，它们相交的条件正是方程 (12.40) 的第二个条件. 用代换 $t=\cos\theta$ 可完成这积分，

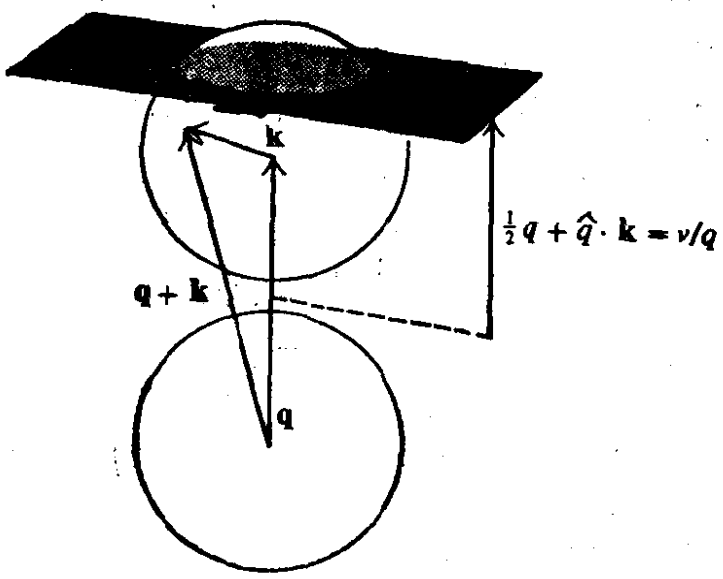


图 12.6 $q>2$ 时 $\mathrm{Im}\Pi^0$ 的积分区域 (Fermi 球的半径是单位长度)

$$\mathrm{Im}\,\Pi^0(\mathbf{q},\nu)=-\frac{mk_F}{4\pi^2\hbar^2}2\pi\int_{\nu/q-\frac{1}{2}q}^{1}k^2dk\int_{-1}^{1}dt$$
$$\times\frac{1}{qk}\delta\left(\frac{\nu}{qk}-\frac{1}{2}\frac{q}{k}-t\right),$$

在方程 (12.40) 对变量的限制下,初等的运算给出

$$\mathrm{Im}\,\Pi^0(\mathbf{q},\nu)=-\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi q}\left[1-\left(\frac{\nu}{q}-\frac{1}{2}q\right)^2\right]. \quad (12.41)$$

如果 ν 位于方程 (12.40) 所规定的区域外面，积分为零.

$$2.\ q<2,\quad q+\frac{1}{2}q^2\geqslant\nu\geqslant q-\frac{1}{2}q^2. \quad (12.42)$$

如果 $q<2$，则条件 $k<1$ 和 $|\mathbf{q}+\mathbf{k}|>1$ 所规定的两个

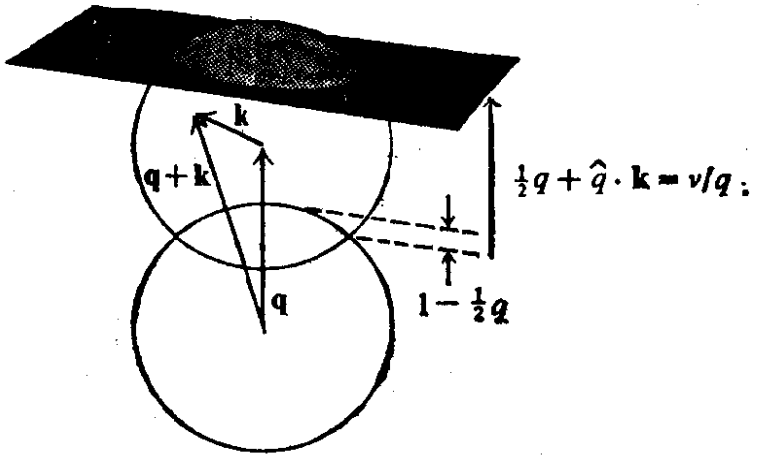


图 12.7　$q<2$ 时 $\mathrm{Im}\Pi^0$ 的积分区域.

球相交，其典型的位形示于图 12.7. 如果能量传递 ν 太大，这平面与上面的球不相交，在这种情况下，$\mathrm{Im}\,\Pi^0$ 为零. 随着 ν 减小，截面开始是个圆，直到 ν 变得足够地小，以至平面开始与下面那个被禁止的 Fermi 球相交. 相交截面保持为圆的有限的范围正是方程 (12.42) 所规定的范围；完全同前面一样地完成这积分，结果是

$$\mathrm{Im}\,\Pi^0(\mathbf{q},\nu)=-\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi q}\left[1-\left(\frac{\nu}{q}-\frac{1}{2}q\right)^2\right]. \quad (12.43)$$

$$3.\ q<2,\quad 0\leqslant\nu\leqslant q-\frac{1}{2}q^2. \quad (12.44)$$

在这个情况中，平面穿过下面那个被禁止 Fermi 球，因而容许的截面区域成为环域，如图 12.7 所示. 这个环域的面积可用图 12.8 中的几何关系来计算，该图表明 k 的极小值由下式给

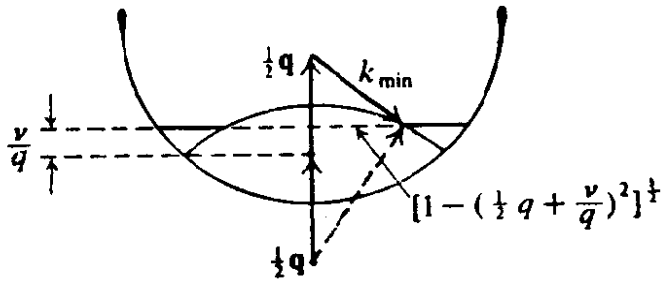


图 12.8　方程(12.45)所用的动量空间中的几何关系.

出

$$k_{\min}^2=\left(\frac{1}{2}q-\nu q^{-1}\right)^2+\left[1-\left(\frac{1}{2}q+\nu q^{-1}\right)^2\right]=1-2\nu,$$

而 k 的极大值是 Fermi 动量(在现在的单位制中，$k_{\max}=1$)。积分现在可以直接算出:

$$\begin{aligned}\operatorname{Im}\Pi^0(\mathbf{q},\nu)&=-\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi^2}2\pi\int_{(1-2\nu)^{1/2}}^{1}\frac{kdk}{q}\\&\quad\times\int_{-1}^{1}dt\delta\left(\frac{\nu}{qk}-\frac{1}{2}\frac{q}{k}-t\right)\\&=-\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi q}[1-(1-2\nu)]\\&=-\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi q}2\nu.\end{aligned}\tag{12.45}$$

方程 (12.41)、(12.43) 和 (12.45) 对一切 $\mathbf{q}$ 和 ν 值确定了 $\operatorname{Im}\Pi^0(\mathbf{q},\nu)$. 我们在两种有意义的情况下，对于固定 $|\mathbf{q}|$ 把 $-(4\pi\hbar^2/mk_F)\operatorname{Im}\Pi^0(\mathbf{q},\nu)$ 的示意图描画于图 12.9 a 和 12.9 b.

对许多应用来说，列举零级极化部分的某些极限形式是有益的:

1. 固定动量 q，而令能量传递 ν 趋于0:

$$\operatorname{Im}\Pi^0(q,0)=0,\tag{12.46 a}$$

$$\operatorname{Re}\Pi^0(q,0)=\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{2\pi^2}\left[-1+\frac{1}{q}\left(1-\frac{1}{4}q^2\right)\right.$$

$$\times \ln\left|\left(1-\frac{1}{2}q\right)\Big/\left(1+\frac{1}{2}q\right)\right|\Bigg]. \quad (12.46\,b)$$

2. 固定能量传递 ν，而令动量传递趋于 0：

$$\mathrm{Im}\,\Pi^0(0,\nu)=0, \quad (12.47\,a)$$

$$\mathrm{Re}\Pi^0(q,\nu)\approx\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{2\pi^2}\frac{2}{3}\frac{q^2}{\nu^2} \qquad (q\to 0). \quad (12.47\,b)$$

3. 最后，固定能量传递与动量传递之比 $\nu/q\equiv x$，并且令动量传递 q 趋于 0：

$$\mathrm{Im}\,\Pi^0(q,qx)=\begin{cases}-\dfrac{mk_F}{\hbar^2}\dfrac{x}{2\pi} & (q\to 0,\ 0\leqslant x\leqslant 1),\\ 0 & (q\to 0,\ x>1),\end{cases} \quad (12.48\,a)$$

$$\mathrm{Re}\,\Pi^0(q,qx)=-\frac{mk_F}{\hbar^2}\frac{1}{2\pi^2}\left(2-x\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right) \qquad (q\to 0). \quad (12.48\,b)$$

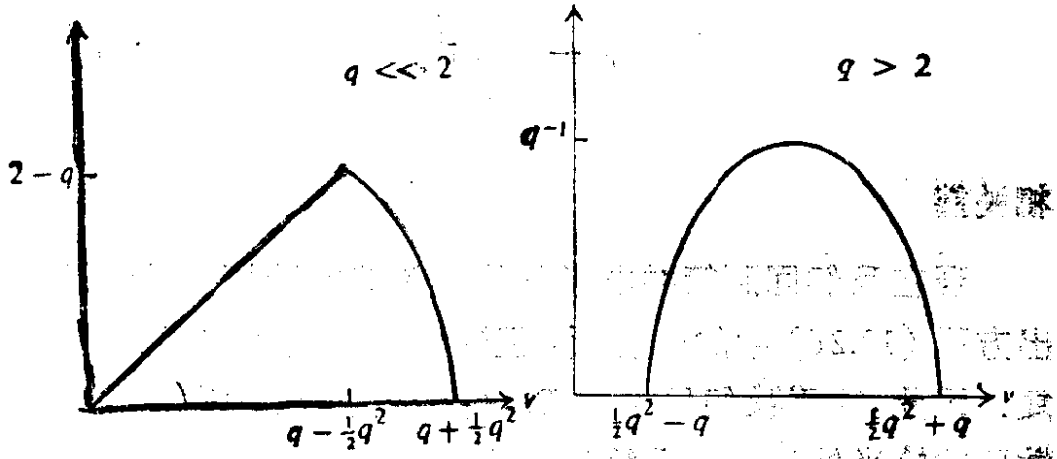


图 12.9　对于典型 q 值的 $-(4\pi\hbar^2/mk_F)\mathrm{Im}\Pi^0(\mathbf{q},\nu)$的示意图.

$\Pi^0(q,\nu)$ 的表达式现在可用以求出环形近似下的相应介电常数 $\kappa_r(q,\nu)=1-U_0(q)\Pi^0(q,\nu)$. 零级极化已表示为 $mk_F/\hbar^2$ 乘以一个无量纲的函数；因此，无量纲量 $U_0\Pi^0$ 具有典型值 $(mk_F/\hbar^2)(4\pi e^2/k_F^2)=4\pi(k_Fa_0)^{-1}=4\pi(4/9\pi)^{\frac{1}{3}}r_s$ [比较方程 (3.20) 到 (3.22) 以及方程 (3.29)]. 事实上，我们只需

要刚才讨论的三种极限情况，我们得到

1. 固定 q，令 $\nu \to 0$：

$$\kappa_r(q, 0) = 1 + \frac{2\alpha r_s}{\pi q^2}\left[1 - \frac{1}{q}\left(1 - \frac{1}{4}q^2\right)\right.$$
$$\left. \times \ln\left|\left(1 - \frac{1}{2}q\right)\Big/\left(1 + \frac{1}{2}q\right)\right|\right]. \quad (12.49)$$

2. 固定 ν，令 $q \to 0$：

$$\kappa_r(0, \nu) = 1 - \frac{4\alpha r_s}{3\pi\nu^2}. \quad (12.50)$$

3. 固定 $\nu/q \equiv x > 0$，令 $q \to 0$：

$$\kappa_r(q, qx) = 1 + \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2}\left[1 - \frac{x}{2}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right]$$
$$+ \frac{2i\alpha r_s x}{q^2}\theta(1-x). \quad (12.51)$$

这里 q 和 ν 都是无量纲的，而 α 是数字常数[1]

$$\alpha = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (12.52)$$

相关能

现在我们回到简并电子气体相关能的计算. 虽然可以算出方程(12.26)中的一切项，但这种计算大都是第30节的重复. 因此，这里我们只考虑 E_r，它包含了 E_2^r 中出现的对数发散项的恰当处理，因而给出在相关能中占支配地位的贡献. 方程(12.23)中的对 λ 积分可以算出来如下[见方程(12.24)]，

$$E_r = \frac{1}{2}iV\hbar(2\pi)^{-4}\int d^4q \int_0^1 d\lambda\lambda$$
$$\times [U_0(q)\Pi^0(q)]^2[1 - \lambda U_0(q)\Pi^0(q)]^{-1}$$

1) 我们采用这个历史的记号 但这并不好，因为 α 并不是这个问题中的精细结构常数.

$$= -\frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int d^4q$$
$$\times \{\log[1 - U_0(q)\Pi^0(q)] + U_0(q)\Pi^0(q)\}$$
$$= -\frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int d^4q$$
$$\times \{\log[\kappa_r(q)] + 1 - \kappa_r(q)\}. \qquad (12.53)$$

引入无量纲变量 $\nu = mq_0/\hbar k_F^2$ 和 $\mathbf{q}' = \mathbf{q}/k_F$ 再次是有好处的. 于是,借助于方程 (3.21)、(3.22)、(3.29) 和 (12.52),环形近似的能量贡献成为

$$E_r = \frac{Ne^2}{2a_0}\varepsilon_r, \qquad (12.54)$$

其中

$$\varepsilon_r = -\frac{3i}{16\pi^2\alpha^2 r_s^2}\int d^3q'\int_{-\infty}^{\infty} d\nu$$
$$\times \{\log[\kappa_r(q',\nu)] + 1 - \kappa_r(q',\nu)\}. \qquad (12.55)$$

能量 ε_r 必定是实的,我们只考虑方程 (12.55) 的实部. 此外,κ_r 是 ν 的偶函数,这使我们可以简化积分限(现在略去 q 的上角撇):

$$\varepsilon_r = \frac{3}{2\pi\alpha^2 r_s^2}\int_0^{\infty} q^2dq\int_0^{\infty} d\nu$$
$$\times \left\{\tan^{-1}\left[\frac{\kappa_{r2}(q,\nu)}{\kappa_{r1}(q,\nu)}\right] - \kappa_{r2}(q,\nu)\right\}, \qquad (12.56)$$

这里已将介电函数分成实部和虚部

$$\kappa_r = \kappa_{r1} + i\kappa_{r2}$$

并且利用了关系式

$$\log(\kappa_{r1} + i\kappa_{r2}) = \frac{1}{2}\ln(\kappa_{r1}^2 + \kappa_{r2}^2) + i\tan^{-1}\frac{\kappa_{r2}}{\kappa_{r1}}.$$

如前面所注意到,电子气体的奇异行为,出现于波矢很小时 ($q \ll 1$), 因而我们把对 q 的积分划分成两部份, $q < q_c$

和 $q > q_c$，

$$\varepsilon_{r1} = \frac{3}{2\pi\alpha^2 r_s^2}\int_0^{q_c} q^2 dq \int_0^{\infty} d\nu \times\left\{\tan^{-1}\left[\frac{\kappa_{r2}(q,\nu)}{\kappa_{r1}(q,\nu)}\right] - \kappa_{r2}(q,\nu)\right\},$$

$$\varepsilon_{r2} = \frac{3}{2\pi\alpha^2 r_s^2}\int_{q_c}^{\infty} q^2 dq \int_0^{\infty} d\nu \times\left\{\tan^{-1}\left[\frac{\kappa_{r2}(q,\nu)}{\kappa_{r1}(q,\nu)}\right] - \kappa_{r2}(q,\nu)\right\}.$$

这个划分把发散部分孤立出来，发散部分只出现于第一项 ε_{r1} 中；据此，ε_{r2} 是有限的，并可按 r_s 的幂次展开．此外，如果 q_c 选得远小于 1，则计算 ε_{r1} 时，κ_r 可用其极限形式［方程 (12.51)］作为近似，因而给出一个容易处理的积分．κ_r 的虚部正比于 $-V(q)\,\mathrm{Im}\,\Pi^0(q,\nu)$，这是正的或零［见方程 (12.39)］．这样，$\tan^{-1}(\kappa_{r2}/\kappa_{r1})$在 0 与 π 之间变化．特定地说，如 $\kappa_{r2}=0$ 且 $\kappa_{r1}>0$，则 $\tan^{-1}(\kappa_{r2}/\kappa_{r1})=0$，而当 $\kappa_{r2}=0$ 且 $\kappa_{r1}<0$，则 $\tan^{-1}(\kappa_{r2}/\kappa_{r1})=\pi$．在区域 $0\leqslant q\leqslant q_c\ll 1$ 内，可以用方程 (12.51) 的近似表示式，我们求得

$$\begin{aligned}\varepsilon_{r1} &= \frac{1}{2\pi\alpha^2 r_s^2}\int_0^{q_c} q^3 dq \int_0^{\infty} dx \times\left\{\tan^{-1}\left[\frac{2\alpha r_s x\theta(1-x)}{q^2+2\alpha r_s f(x)}\right] - \frac{2\alpha r_s x\theta(1-x)}{q^2}\right\}\\ &= \frac{6}{\pi\lambda^2}\int_0^{q_c} q^3 dq \left\{\int_0^1 dx\left[\tan^{-1}\left(\frac{\lambda x}{q^2+\lambda f(x)}\right) - \frac{\lambda x}{q^2}\right] + \int_1^{\infty} dx\,\pi\theta[-q^2-\lambda f(x)]\right\}\\ &\equiv I_1 + I_2, \end{aligned} \tag{12.57}$$

其中

$$f(x) = \frac{2}{\pi}\left(1 - \frac{1}{2}\,x\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right) \tag{12.58}$$

而

$$\lambda \equiv 2\alpha r_s. \tag{12.59}$$

方程 (12.57) 中的两项分别来源于 $q\nu$ 平面上 $\kappa_{r2} > 0$ 和 $\kappa_{r2} = 0$ 的区域.

如果我们现在把 ϵ_r 展开为耦合常数 $\lambda \propto e^2$ 的幂级数，则头一项必须重现第二级项 $(2a_0/Ne^2)E_2^r$. 特别是，小 q 的奇异性已被孤立在 I_1 中，我们得

$$\begin{aligned} I_1 &\approx \frac{6}{\pi\lambda^2}\int_0^{q_c} q^3 dq \int_0^1 dx\left[\frac{\lambda x}{q^2} - \frac{\lambda^2 x f(x)}{q^4} + \cdots - \frac{\lambda x}{q^2}\right] \\ &= -\frac{6}{\pi}\int_0^{q_c}\frac{dq}{q}\int_0^1 dx x f(x) + O(\lambda). \end{aligned}$$

由于库仑势 $V(q)$ 的 q^{-2} 行为，这个微扰展开式的第一项在原点对数发散. 这样，我们看到，本节开始所指出的 E_2^r 是对数发散的. 然而，准确的积分 I_1 包括了 λ 的一切级的项，它的被积函数在 $q \to 0$ 时是有限的. 更精确地说，对于 $q^2 < \lambda f(x)$，被积函数对 q^{-4} 的依赖性已经截断. 其后果是 I_1 可以以对数的准确性算出如下:

$$\begin{aligned} I_1 &\approx -\frac{6}{\pi}\int_{\lambda^{1/2}}^{q_c}\frac{dq}{q}\int_0^1 dx x f(x) \\ &= \frac{6}{\pi^2}\ln\left(\frac{\lambda}{q_c^2}\right)\int_0^1 dx x\left(1 - \frac{1}{2}x\ln\frac{1+x}{1-x}\right) \\ &= \frac{2}{\pi^2}(1 - \ln 2)\ln\frac{\lambda}{q_c^2}, \end{aligned} \tag{12.60}$$

这意味着

$$\epsilon_{\text{相关}} = 2\pi^{-2}(1 - \ln 2)\ln r_s + \text{常数} \quad (r_s \to 0). \tag{12.61}$$

这结果最初由 Macke 得到[1]. 注意这表示式对 r_s 是非解析的，不存在 $r_s = 0$ 附近的幂级数.

---

1) W. Macke, *Z. Naturforch*, **5a**: 192 (1950).

为得出相关能中的常数项，需要计算方程(12.26)中所有其余的项．具体地说，至关紧要的是证明在 ϵ_r 的最终答案中并不出现任意的波数 q_c．这个计算非常类似于第 30 节中的，这里不重复．此外，容易看出 E_2^c 和 E_2^d 恒为零，而

$$E_2^b = \frac{Ne^2}{2a_0}\epsilon_2^b$$

正是习题 1.4 研究过的第二级交换能．最后的表示式只能由数值计算得出，相关能成为

$$\frac{E_{\text{相关}}}{N} = \frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{2}{\pi^2}(1-\ln 2)\ln r_s - 0.094 + O(r_s \ln r_s)\right]$$

$$= \frac{e^2}{2a_0}[0.0622\ln r_s - 0.094 + O(r_s \ln r_s)], \quad (12.62)$$

准确到 $\ln r_s$ 和 r_s^0 的数量级[1]．把这里的论证加以延伸，DuBois[2] 证明，在微扰的各级，第二等发散项[幂次比 $U(q)$ 的幂次低一的那些项]之和给出对方程 (12.62) 的 $r_s \ln r$ 数量级的改正．

有效相互作用

我们曾经提到由于 $U_0(\mathbf{q})$ 是 $(\mathbf{q})^{-2}$ 奇异的，微扰展开失效．与此相反，对有效相互作用 $U_r(\mathbf{q}, q_0)$ 的环形近似在长波具有完全不同的性质．为简单起见，我们将只考虑静态极限 ($q_0 = 0$)，方程 (12.24) 和 (12.49) 的结合给出

---

1) 对数项首先由 M. Macke 得到，前引文，而完整的表示式则是由 M. Gell-Mann 和 Brueckner 推得，前引文．也见 L. Onsager, L. Mittag 和 M. J. Stephen *Ann. Physik*, **18**: 71 (1966)

2) D. F. DuBois, *Ann. Phys.* (N. Y.) **7**: 174 appendix C, (1959). DuBois 的计算由 W. J. Carr, Jr. 和 A. A. Maradudin 重复并订正，*Phys. Rev.* **133**: A371 (1964)，他们求得 $0.018 r_s \ln r_s$ 作为对 $\epsilon_{\text{相关}}$ 的下一级修正．

$$U_r(\mathbf{q},0)=\frac{4\pi e^2}{q^2+(4\alpha r_s/\pi)k_F^2 g(q/k_F)},\qquad(12.63)$$

其中

$$g(x)=\frac{1}{2}-\frac{1}{2x}\left(1-\frac{1}{4}x^2\right)\times\ln\left|\left(1-\frac{1}{2}x\right)\Big/\left(1+\frac{1}{2}x\right)\right|.\qquad(12.64)$$

这样，由电子和正电背景组成的介质修改了库仑定律．从方程(12.63)可清楚地看到：只有对波长 $(q/k_F)^2\leqslant r_s$，这修改才是重要的；在高密度极限，这时 $r_s\to 0$，因而可用 $g(0)=1$ 作为 $g(q/k_F)$ 的近似，因而

$$U_r(\mathbf{q},0)\underset{r_s\to 0}{\approx}\frac{4\pi e^2}{q^2+(4\alpha r_s/\pi)k_F^2}.\qquad(12.65)$$

因此，对于 $q^2\lesssim r_s k_F^2$，有效势被截断，而在 $q=0$ 是有限的，这证实了方程(12.23)下面的论断．这个行为对方程(12.60)和习题 1.5 中求 $\varepsilon_{\text{相关}}$ 时所用的截断提供了物理基础．

虽然方程(12.65)只是方程(12.63)所给出的准确的 $U_r(\mathbf{q},0)$ 的近似表示，但这个近似表达式很易进行 Fourier 变换，它给出 Yukawa 势．我们因而得到坐标空间中有效相互作用的定性描述

$$V_r(\mathbf{x})\approx e^2 e^{-q_{TF}x}x^{-1}.\qquad(12.66)$$

因此在两个电荷之间的简单的 e^2/x 库仑势被“屏蔽”了，屏蔽长度是下式所确定的 Thomas-Fermi[1] 屏蔽长度

$$q_{TF}^2=\frac{4\alpha r_s}{\pi}k_F^2=\frac{4}{\pi}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}}r_s k_F^2=0.66 r_s k_F^2.\qquad(12.67)$$

事实上，方程(12.63)的非解析结构使 $V_r(\mathbf{x})$ 的实际表示式相当复杂，第 14 节将详细讨论．

在本节，$U_r(\mathbf{q},q_0)$ 只用来计算相关能，它是平衡性质．

1) Thomas-Fermi 理论在第 14 节叙述．

然而，如上一段所指出，因为 U_r 决定有效的静态的或动力学的粒子间势，所以它包含了多得多的物理信息.这个行为实际上是对外界微扰的响应的一个具体例子. 由于这个原因，我们先发展线性响应的一般理论（第五章），然后再回到简并电子气体的非平衡性质.

习　　题

4.1　一个均匀的自旋为 s 的 Fermi 系统，其相互作用势为与自旋无关的 $V(\mathbf{x}) = V_0 x^{-1} e^{-x/a}$.

(a) 试计算在 Hartree-Fock 近似下的正规自能. 从而求出激发谱 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 和 Fermi 能 $\varepsilon_F = \mu$.

(b) 证明，对 ε_F 的交换贡献对于长程相互作用 ($k_F a \gg 1$) 是可忽略的，但是对于短程相互作用 ($k_F a \ll 1$)，直接项和交换项是可比拟的.

(c) 在这个近似下证明，有效质量 m^* 单单由交换贡献决定. 算出 m^*，并讨论两种极限情况 $k_F a \gg 1$ 和 $k_F a \ll 1$.

(d) 这个模型的极限情况 $a \to \infty$ 和均匀正电背景中的电子气体之间的关系是怎样的?

4.2　用方程 (11.70) 以确定习题 4.1 所考虑的系统的基态能量的第一级移动. 把这计算与直接的方法进行比较.

4.3　用 1S 库仑波函数作为近似的 Hartree-Fock 波函数，试计算原子 He 的电离能，并与下列实验值比较，$He \longrightarrow He^+ + e^-$ (24.48 电子伏)而 $He \longrightarrow He^{++} + 2e^-$ (78.88 电子伏). 证明这个方法实际上是变分计算，并根据这个看法改进你的结果. 你将怎样进一步改进这些计算?

4.4　习题 3.4 的方程可认为是无穷级的方程组中的第一级，在这个方程组里，n 个粒子的 G 与 $n-1$ 个和 $n+1$ 个粒子的 G 相耦合. 通常的计算方案是用较低级（对 n 而言）的

Green 函数来近似 n 个粒子的 G，从而把这些方程“去耦”。例如，用 Wick 定理证明，无相互作用的 2 粒子 G 满足

$$G_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\mathbf{x}_1t_1,\ \mathbf{x}_2t_2;\ \mathbf{x}_1't_1',\ \mathbf{x}_2't_2')$$
$$= G_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}_1t_1,\ \mathbf{x}_1't_1')G_{\beta\delta}(\mathbf{x}_2t_2,\ \mathbf{x}_2't_2')$$
$$\pm G_{\alpha\delta}(\mathbf{x}_1t_1,\ \mathbf{x}_2't_2')G_{\beta\gamma}(\mathbf{x}_2t_2,\mathbf{x}_1't_1').$$

用同一表示式作为相互作用的 2 粒子 G 的近似，并验证所得出的 1 粒子 G 的自洽近似重现 Hartree-Fock 近似.

4.5 对于方程 (9.21) 所给出的与自旋有关的势，自旋为 1/2 的粒子的 Hartree-Fock 方程是怎样修订的?

4.6 一个自旋为 1/2 的均匀 Fermi 气体，只通过力程为 a 的 p 波刚性核势而相互作用，于是对于 $ka\to 0$，$\delta_1\to -(ka)^3/3$.

(a) 从 Galitskii 方程证明直到 $(k_Fa)^3$ 数量级的正规自能由下式给出

$$\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\frac{(k_Fa)^3}{\pi}\left[\frac{3}{5}+\left(\frac{k}{k_F}\right)^2\right].$$

(b) 证明基态能量作为 k_F 的幂级数，头两项是

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\left[\frac{3}{5}+\frac{3}{5\pi}(k_Fa)^3\right].$$

(c) 证明谱是有效质量的严格的二次式，其有效质量由 $m^*/m = 1-(k_Fa)^3/\pi$ 所给出，准确到数量级 $(k_Fa)^3$.

4.7 给定一个均匀的 Fermi 气体，其简并因子为 g，试证明

(a) 对于力程为 a 的刚性核势，基态能量表示式成为

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\left\{\frac{3}{5}+(g-1)\left[\frac{2k_Fa}{3\pi^2}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{4}{35\pi^2}(11-2\ln 2)(k_Fa)^2\right]+O[(k_Fa)^3]\right\}.$$

(b) 习题 4.6 的结果成为

$$\frac{E}{N}=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\left[\frac{3}{5}+(g+1)\frac{(k_Fa)^3}{5\pi}\right].$$

4.8 验证方程 (11.63)、(11.65) 和 (11.68).

4.9 对于简并电子气体，试证明，到相互作用的第一级，$\Sigma^*(\mathbf{q})$ 由下式给出

$$\hbar\Sigma^*_{(1)}(\mathbf{q})=-\frac{e^2}{2\pi}\left(\frac{k_F^2-q^2}{q}\ln\frac{|k_F+q|}{|k_F-q|}+2k_F\right).$$

画出所得的单粒子谱示意图. 讨论有效质量 $m^*(q)$，它的定义是 $m^*(q)\equiv(\hbar^2q)(\partial\varepsilon_q/\partial q)^{-1}$.

4.10 应用习题 1.7 于非理想的自旋 1/2 的 Fermi 气体，并证明对于 $k_Fa>\pi/2$ 基态成为部份磁化的.

4.11 验证方程 (12.36).

4.12 自旋为 s 的费米子，通过与自旋无关的静态势 $V(\mathbf{q})$ 而相互作用.

(a) 试分析正规极化的 Feynmann 图解，并证明

$$\Pi^*_{\alpha\beta,\lambda\mu}(q)=\Pi^*(q)(2s+1)\delta_{\beta\lambda}\delta_{\alpha\mu}$$

[见方程 (9.44 b)].

(b) 求解 $\Pi_{\alpha\beta,\lambda\mu}(q)$ 的 Dyson 方程(比较习题3.15)

(c) 证明，$D(q)$ [方程(12.12)]等于 $\hbar\Pi_{\alpha\alpha,\lambda\lambda}(q)$，从而重新推导表示式 $D(q)=\hbar\Pi^*(q)[1-V(\mathbf{q})\Pi^*(q)]^{-1}$.

4.13 试对任意的势 $V(\mathbf{q})$ 考虑图 12.3 中的图解，证明在均匀介质中只有 $\Pi^*_{(1)b}$ 是非零的. 用方程 (12.21) 以算出 E_2^b，并证明它符合于习题 1.4 的结果.

4.14 (a) 对方程 (12.57)，试先完成 q 的积分，然后按 r_s 幂次展开从而算出 ε_{r1}.

(b) 试直接按 r_s 的幂次展开以算出方程 (12.56) 下面所定义的 ε_{rx}.

(c) 证明 $\varepsilon_{r1} + \varepsilon_{r2}$ 与 q_c 无关，并把你的 $\varepsilon_{相关}$ 中的常数项的表式与下列文章所得的结果比较，K. Sawada, *Phys. Rev.*, **106**:372 (1957) 和 K. Sawada, K. A. Brueckner, N. Fukuda and R. Bront, *Phys. Rev.*, **108**:507 (1957).

第五章　线性响应和集体模

上一章集中研究了 Fermi 系统在零温度下的平衡性质，以及添加一个或除去一个粒子以后的单粒子激发谱．这些费米子的激发，可通过一些过程直接观察，例如金属中的正电子湮灭、核反应等等．此外，大多数的物理系统还有不改变粒子数的长寿激发态．这些激发(声子、自旋波等)具有玻色子的特征，常常称为集体模．它们可用一些实验探测器来检测，这些探测器是直接与粒子密度、自旋密度、或其它粒子守恒算符相耦合的．典型的实验是金属和原子核对电磁波或电子的散射、或者晶体和液体 He^4 对中子的散射．所有这些探测器和被研究的系统有弱的相互作用，因而可用 Born 近似来处理．为了提供一个一般背景，我们将首先讨论对弱的外界扰动的线性响应理论．

13. 对外界微扰的线性响应的一般理论

考虑一个相互作用的多粒子系统，其哈密顿函数 $\hat{H}$ 与时间无关．在 Schrödinger 图象中的准确态矢量 $|\Psi_S(t)\rangle$ 满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi_S(t)\rangle}{\partial t}=\hat{H}|\Psi_S(t)\rangle, \tag{13.1}$$

其显式解为

$$|\Psi_S(t)\rangle=e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi_S(0)\rangle. \tag{13.2}$$

假设在 $t=t_0$ 时外加一个含时间的哈密顿函数 $\hat{H}^{ex}(t)$ 使系

统受到扰动. 这个新的 Schrödinger 态矢量 $|\Psi_S(t)\rangle$ 满足修改过的方程 $(t > t_0)$

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi_S(t)\rangle}{\partial t} = [\hat{H} + \hat{H}^{ex}(t)]|\Psi_S(t)\rangle, \qquad (13.3)$$

我们将寻求下列形式的解:

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}(t)|\Psi_s(0)\rangle, \qquad (13.4)$$

其中算符 $\hat{A}(t)$ 遵从因果性的边界条件

$$\hat{A}(t) = 1 \quad (t \leqslant t_0). \qquad (13.5)$$

方程 (13.3) 和 (13.4) 的结合给出 $\hat{A}(t)$ 的算符方程:

$$i\hbar\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t} = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{H}^{ex}(t)e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}(t)$$
$$\equiv \hat{H}_H^{ex}(t)\hat{A}(t), \qquad (13.6)$$

这里 $\hat{H}_H^{ex}(t)$ 是利用了全部相互作用 $\hat{H}$ 的通常的 Heisenberg 图象中的算符.

方程 (13.6) 可就 $t > t_0$ 用迭代法解出:

$$\hat{A}(t) = 1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t') + \cdots, \qquad (13.7)$$

这里因果性边界条件 [方程(13.5)]自动满足, 因为当 $t < t_0$ 时, $\hat{H}^{ex}(t) = 0$. 相应的态矢量由下式给出:

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi_S(0)\rangle - i\hbar^{-1}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$
$$\times\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t')|\Psi_S(0)\rangle + \cdots. \qquad (13.8)$$

所有有意义的物理信息都包含在 Schrödinger 图象的算符 $\hat{O}_S(t)$ 的矩阵元中(它可以显示地依赖于时间):

$$\langle\hat{O}(t)\rangle_{ex} \equiv \langle\Psi'_S(t)|\hat{O}_S(t)\Psi_S(t)\rangle$$
$$= \langle\Psi'_S(0)|\left[1 + i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t') + \cdots\right]$$
$$\times e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_S(t)e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$
$$\times\left[1 - i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t') + \cdots\right]|\Psi_S(0)\rangle$$

$$= \langle \Psi'_H(0)|\hat{O}_H(t)|\Psi_H(0)\rangle + i\hbar^{-1}\langle \Psi'_H(0)| \int_{t_0}^{t} dt'[\hat{H}_H^{ex}(t'),\hat{O}_H(t)]|\Psi_H(0)\rangle + \cdots. \quad (13.9)$$

这里只保留了 $\hat{H}^{ex}$ 的线性项，而下标 H 表示相对于不含时间的哈密顿函数 $\hat{H}$ 的 Heisenberg 图象 [比较方程 (6.28) 和 (6.32)]. 由于外加微扰而引起的矩阵元第一级改变，在这里已用有相互作用但未受微扰的系统的准确 Heisenberg 算符表出. 具体讲，如果 $|\Psi_H\rangle$ 和 $|\Psi'_H\rangle$ 两者都表示归一化的基态 $|\Psi_0\rangle$，则算符的基态期待值的线性响应由下式给出

$$\delta\langle\hat{O}(t)\rangle \equiv \langle\hat{O}(t)\rangle_{ex} - \langle\hat{O}(t)\rangle = i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} dt'\langle\Psi_0|[\hat{H}_H^{ex}(t'),\hat{O}_H(t)]|\Psi_0\rangle. \quad (13.10)$$

作为一个特例，考虑每个粒子带电荷 e 的系统，在 $t = t_0$ 时加上一个外加标量势 $\varphi^{ex}(\mathbf{x}t)$. 相应的外界微扰等于

$$\hat{H}_H^{ex}(t) = \int d^3x\hat{n}_H(\mathbf{x}t)e\varphi^{ex}(\mathbf{x}t), \quad (13.11)$$

这里 $\hat{n}_H$ 是未受微扰系统的准确粒子密度算符. 这线性响应可用密度变化来表征，

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle &= i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} dt' \int d^3x' e\varphi^{ex}(\mathbf{x}'t') \\ &\quad \times \langle\Psi_0|[\hat{n}_H(\mathbf{x}'t'),\hat{n}_H(\mathbf{x}t)]|\Psi_0\rangle \\ &= i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} dt' \int d^3x' e\varphi^{ex}(\mathbf{x}'t') \\ &\quad \times \langle\Psi_0|[\tilde{n}_H(\mathbf{x}'t'),\tilde{n}(\mathbf{x}t)]|\Psi_0\rangle, \quad (13.12)\end{aligned}$$

这里我们引入了密度偏差算符 $\tilde{n}_H(\mathbf{x}t) \equiv \hat{n}_H(\mathbf{x}t) - \langle\hat{n}_H(\mathbf{x}t)\rangle$ [比较方程 (12.3)]. (注意到 c 数总是可对易的.) 如果类比于方程 (12.5)，定义推迟密度相关函数

$$iD^R(x,x') = \theta(t-t')\frac{\langle\Psi_0|[\tilde{n}_H(x),\tilde{n}_H(x')]|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}, \quad (13.13)$$

则方程 (13.12) 可改写为

$$\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle = \hbar^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int d^3x' D^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')e\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{x}'t'), \quad (13.14)$$

这里因果性由 D^{R} 的推迟本性而实现，我们还用到了当 $t' < t_0$ 时 φ^{ex} 为零这一事实. 方程 (13.14) 是这样一个普遍结果的典型例证，即一个算符对外微扰的线性响应可表为一个适当的推迟相关函数的时间空间积分.

如果系统是空间均匀的，则 $D^{\mathrm{R}}(x, x') = D^{\mathrm{R}}(x - x')$，引入 Fourier 变换是有益的，

$$\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{k},\omega) \equiv \int d^3x \int dt\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}e^{i\omega t}\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{x}t), \quad (13.15)$$

$$\delta\langle\hat{n}(\mathbf{k},\omega)\rangle \equiv \int d^3x \int dt\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}e^{i\omega t}\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle, \quad (13.16)$$

$$D^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega) \equiv \int d^3x \int dt\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}e^{i\omega t}D^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}t). \quad (13.17)$$

这样，方程 (13.14) 立即成为

$$\delta\langle n(\mathbf{k},\omega)\rangle = \hbar^{-1}D^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)e\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{k},\omega), \quad (13.18)$$

它表明，系统是在与微扰相同的波矢和频率上作出响应. 这个关系式有时用来定义广义的极化率

$$\chi_{nn}(\mathbf{k},\omega) \equiv \frac{\delta\langle\hat{n}(\mathbf{k},\omega)\rangle}{e\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{k},\omega)} = \hbar^{-1}D^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega). \quad (13.19)$$

这样的关系式在研究输运系数时特别有用，这些系数代表广义极化率的某些长波和低频极限(参看习题 9.7).

前面的分析表明，线性响应用准确的 Heisenberg 算符的推迟相关函数来表示最简单. 遗憾的是，这样的相关函数不能直接用 Feynman-Dyson 微扰级数来计算，因为 Wick 定理只适用于算符的编时乘积. 因此，定义一个与此相联系的，同

问题，可用 Lehmann 表示解决．第 7 节已给出了一个特例，那里证明了 $G(\mathbf{k}, \omega)$ 和 $G^{R}(\mathbf{k}, \omega)$ 满足方程 (7.67) 和 (7.68)．显然这个方法是很一般的，我们在这里叙述密度相关函数的相应的关系式(习题 3.8)

$$\begin{cases} \mathrm{Re}D(\mathbf{q}, \omega) = \mathrm{Re}D^{R}(\mathbf{q}, \omega), \\ \mathrm{Im}D(\mathbf{q}, \omega)\mathrm{sgn}\omega = \mathrm{Im}D^{R}(\mathbf{q}, \omega), \end{cases} \tag{13.20}$$

这对实的 ω 是正确的．(在这个表示式中 $\mathrm{sgn}\omega \equiv \omega/|\omega|$) 方程 (13.20) 是很重要的，因为对 $D(\mathbf{q}, \omega)$ 的任一近似，立即给出一个近似的 $D^{R}(\mathbf{q}, \omega)$，因而也就给出相联系的近似线性响应．从 $D(\mathbf{q}, \omega)$ 的 Lehmann 表示也可清楚看到：这个函数的极点出现在相互作用系集的那样一些态的准确激发能处，这些态是通过密度算符与基态耦合起来的．

14. 电子气体中的屏蔽

作为第一个例子，我们考虑简并电子气体对于带正电 Ze 的静态杂质的响应，这时外势由下式给出

$$\varphi^{ex}(\mathbf{x}t) = Ze\chi^{-1}, \tag{14.1}$$

而

$$\varphi^{ex}(\mathbf{q}, \omega) = 8\pi^{2}Ze q^{-2}\delta(\omega). \tag{14.2}$$

注意这里我们已令 $t_0 \to -\infty$．这个点电荷改变了其邻域的电子分布，方程 (13.16) 和 (13.18) 一起决定了感应粒子密度是(对于电子，相互作用是 $-e\varphi^{ex}$)

$$\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle = -(2\pi)^{-3}\int d^{3}q\, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}D^{R}(\mathbf{q}, 0)4\pi Z e^{2}(\hbar q^{2})^{-1}. \tag{14.3}$$

方程 (12.14) 表明编时密度相关函数 D 等于 $\hbar\Pi$，而 Π 是编时极化部份．如果 Π^{R} 定义为相应的推迟极化，则方程(14.3)取下述简单的形式

$$\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle = -(2\pi)^3\int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\Pi^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},0)4\pi Z e^2 q^{-2}$$

$$= -(2\pi)^3\int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\Pi^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},0)ZU_0(\mathbf{q})$$

$$= -(2\pi)^3 Z\int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}[\Pi^{*}(\mathbf{q},0)U(\mathbf{q},0)]^{\mathrm{R}}$$

$$= -(2\pi)^3 Z\int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\{[\kappa^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},0)]^{-1}-1\}, \quad (14.4)$$

这里第三行是用了 Dyson 方程[见方程 (9.43) 和 (14.5)] 得到的，而第四行是用了方程(12.17)的推迟形式得到的. 以前的微扰分析 (第 12 节) 使我们可以计算编时函数 Π 和 κ，Lehmann 表示于是给出[比较 $D \equiv \hbar\Pi$ 的方程 (13.20)][1)]

$$\Pi^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},\omega) \equiv (\mathrm{Re} + i\mathrm{sgn}\omega\mathrm{Im})\Pi(q,\omega)$$

$$= \mathrm{Re}\Pi(\mathbf{q},\omega) + i\mathrm{sgn}\,\omega\,\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q},\omega), \quad (14.5)$$

$$\kappa^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},\omega) = \mathrm{Re}\kappa(\mathbf{q},\omega) + i\mathrm{sgn}\,\omega\,\mathrm{Im}\kappa(\mathbf{q},\omega). \quad (14.6)$$

方程 (14.4) 和 (14.6) 的结合就给出点电荷周围的屏蔽的准确的描述.

在只保留环形图解的近似下，$\kappa_r(\mathbf{q},0)$ 是纯粹的实数[方程 (12.49)]，而推迟函数成为

$$\kappa_r^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},0) = \kappa_r(\mathbf{q},0) = 1 + 4\alpha r_s k_F^2(\pi q^2)^{-1} g\left(\frac{q}{k_F}\right). \quad (14.7)$$

这里函数 $g(x)$[方程 (12.64)] 由下式给出

$$g(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2x}\left(1-\frac{1}{4}x^2\right)\ln\left|\frac{1-\frac{1}{2}x}{1+\frac{1}{2}x}\right|, \quad (14.8)$$

并有下列极限行为:

---

1) 注意 $[\mathrm{Re} + i\mathrm{sgn}\omega\mathrm{Im}][\mathrm{Re}\kappa + i\mathrm{Im}\kappa]^{-1} = [\mathrm{Re}\kappa - i\mathrm{sgn}\omega\mathrm{Im}\kappa][|\mathrm{Re}\kappa|^2 + |\mathrm{Im}\kappa|^2]^{-1} = [\mathrm{Re}\kappa + i\mathrm{sgn}\omega\mathrm{Im}\kappa]^{-1}$.

$$g(x) \approx 1 + O(x^2) \qquad (x \ll 1), \quad (14.9\,a)$$

$$g(x) \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{4}(x-2)\ln\left[\frac{1}{4}|x-2|\right] \qquad (|x-2| \ll 1), \quad (14.9\,b)$$

$$g(x) \sim \frac{4}{3}x^{-2} \qquad (x \gg 1). \quad (14.9\,c)$$

方程(14.7)可代入方程(14.4)；于是，感应电荷密度成为

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r &= -e\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle_r \\ &= -Ze\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \\ &\quad\times\frac{4\alpha r_S\pi^{-1}g(q/k_F)}{(q/k_F)^2+4\alpha r_S\pi^{-1}g(q/k_F)}. \qquad (14.10)\end{aligned}$$

这个表达式有几个有意思的特点：

1. 总的感应电荷容易确定为

$$\begin{aligned}\delta Q_r &= \int d^3x\,\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r \\ &= -Ze\int d^3q\,\delta(\mathbf{q})\frac{4\alpha r_S\pi^{-1}g(q/k_F)}{(q/k_F)^2+4\alpha r_S\pi^{-1}g(q/k_F)} \\ &= -Ze. \qquad (14.11)\end{aligned}$$

这表明屏蔽在远距离是完全的.

2. 方程(14.10)的被积函数对所有$|q|$都是有界的，并且当 $q\to\infty$ 时按 q^{-4} 趋于零[比较方程(14.9 c)]. 因此感应电荷密度在包括原点在内的任何地方都是有限的，因为

$$\begin{aligned}|\langle\delta\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r| &\leqslant |\langle\delta\hat{\rho}(0)\rangle_r| \\ &= Ze\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{4\alpha r_S\pi^{-1}g(q/k_F)}{(q/k_F)^2+4\alpha r_S\pi^{-1}g(q/k_F)} \\ &< \infty. \qquad (14.12)\end{aligned}$$

这里第一个不等式起源于振荡的指数函数，它减小了 $x\neq 0$ 的电荷密度.

3. 对于小 q^2，奇异的 q^{-2} 的依赖关系在下列波数处被截断

$$q_{\min}=\left(\frac{4\alpha r_s}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}k_F=\left(\frac{4k_F}{\pi a_0}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{6\pi ne^2}{\varepsilon_F^0}\right)^{\frac{1}{2}}\equiv q_{TF} \tag{14.13}$$

[见方程 (3.20) 到 (3.22)，(3.29) 和 (12.67)]，其中 q_{TF} 是 Thomas-Fermi[1] 波数. 感应电荷密度现在可改写为

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r&=-Ze\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\frac{q_{TF}^2g(q/k_F)}{q^2+q_{TF}^2g(q/k_F)}\\&=-\frac{Ze}{2\pi^2x}\int_0^\infty dqq\sin qx\frac{q_{TF}^2g(q/k_F)}{q^2+q_{TF}^2g(q/k_F)}.\end{aligned} \tag{14.14}$$

既然 $g(0)=1$，这诱使人们推论感应电荷密度具有下列渐近形式 $(x\to\infty)$

$$\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r\sim\delta\rho_{TF}(x)\equiv-Zeq_{TF}^2(4\pi x)^{-1}e^{-q_{TF}x}, \tag{14.15}$$

这里 $\delta\rho_{TF}(x)$ 是在 Thomas-Fermi 近似下得到的.

Thomas-Fermi 结果，可按下列方式非常简单地理解. 在 $T=0$，一个无相互作用的 Fermi 气体所施的压强由方程 (5.49 b)给出，

$$P=\frac{2}{5}\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}n^{\frac{5}{3}}. \tag{14.16}$$

如果我们把电荷 Ze 放到均匀的电子气体中（这电子气体置于均匀的具有正的电荷密度 en_0 的固定背景上，这使得未微扰系统为电中性的），于是定域的流体静力学平衡条件要求在一个小的(单位)体积元上的力必须平衡，

$$\sum_i\mathbf{F}_i=0=-\nabla P-en\boldsymbol{\mathscr{E}}, \tag{14.17}$$

---

1) T. H. Thomas, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **23**: 542 (1927); E. Fermi, *Z. Physik*, **48**: 73 (1928). 其对金属应用的初步的叙述可见 J. M. Ziman, "Principles of the Theory of Solids," sec. 5.1 to sec. 5.3, Cambridge University Press, Cambrige, 1964.

这里$\mathscr{E}$是总电场. Poisson 方程成为

$$\nabla \cdot \mathscr{E} = -\nabla^2\varphi = 4\pi[Ze\delta(\mathbf{x}) - e(n - n_0)], \quad (14.18)$$

式中φ是静电势. 现在我们可以写

$$n - n_0 = \delta n, \quad (14.19\,a)$$

$$\nabla n = \nabla \delta n, \quad (14.19\,b)$$

而方程 (14.16)、(14.17) 和 (14.19 b) 的结合给出

$$\frac{2}{3}\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}\frac{1}{n^{\frac{1}{3}}}\nabla\delta n = e\nabla\varphi. \quad (14.20)$$

既然左边按小量来说已经是线性的，因而可用方程 (3.29) 写出

$$\frac{2}{3}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\frac{1}{n_0}\nabla\delta n = e\nabla\varphi. \quad (14.21)$$

这方程的散度与方程 (14.18) 的结合给出

$$(\nabla^2 - q_{TF}^2)\delta n(\mathbf{x}) = -Zq_{TF}^2\delta(\mathbf{x}),$$

或等价地

$$(\nabla^2 - q_{TF}^2)\delta\rho(\mathbf{x}) = Zeq_{TF}^2\delta(\mathbf{x}), \quad (14.22)$$

这里 Thomas-Fermi 波数是方程(14.13)所定义的. 这个方程的解就是方程 (14.15) 所引用的

$$\delta\rho_{TF}(x) = -Zeq_{TF}^2(4\pi x)^{-1}e^{-q_{TF}x}. \quad (14.23)$$

但是，方程 (14.15) 的近似结果是不正确的，因为 $g(x)$在 $x = 2$ 处有一个奇点，它的一级导数在那里成为无限大. 在积分区间 $(0 < q < \infty)$ 中存在这个奇点，使 $\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r$ 对 x 的渐近依赖关系为代数式的，而不是由于在 $q = \pm iq_{TF}$ 近似的单极点应该引起的指数式的行为. 我们可按下面的方式来求出 $\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r$ 的正确渐近行为：首先把 $g(q/k_F)$ 中出现的对数项改写为[见方程 (14.8)]

$$\ln\left|\frac{q - 2k_F}{q + 2k_F}\right| = \lim_{\eta\to 0}\frac{1}{2}\ln\frac{(q - 2k_F)^2 + \eta^2}{(q + 2k_F)^2 + \eta^2}.$$

既然 g 对其宗量而言是偶函数，方程 (14.14) 的积分可写为

$$\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r = \frac{Ze}{4\pi^2 ix}\int_{-\infty}^{\infty} qdqe^{iqx}\left[\frac{q^2}{q^2 + q_{TF}^2 g(q/k_F)} - 1\right]. \tag{14.24}$$

被积函数现在是 q 的解析函数而具有图 14.1 所示的奇异性结构，对数函数的割线是这样选择的，它使对数沿着实轴是实的. 迴路可按图示的那样变形，在 $q \approx iq_{TF}$ 的极点给出方程 (14.15) 的贡献，对于大的 x，它指数式地趋于零. 与此相反，割线向下伸向实轴(相距 η 以内). 沿着两个割线的积分依赖于跨越割线两方的函数之差；这个差完全由对数的周相引起，用图所示割线，我们有

$$\Delta\left[\frac{1}{2}\log\frac{(q-2k_F)^2+\eta^2}{(q+2k_F)^2+\eta^2}\right] = \begin{cases}\pi & (\text{沿 } C_1)\\ -\pi & (\text{沿 } C_2),\end{cases}$$

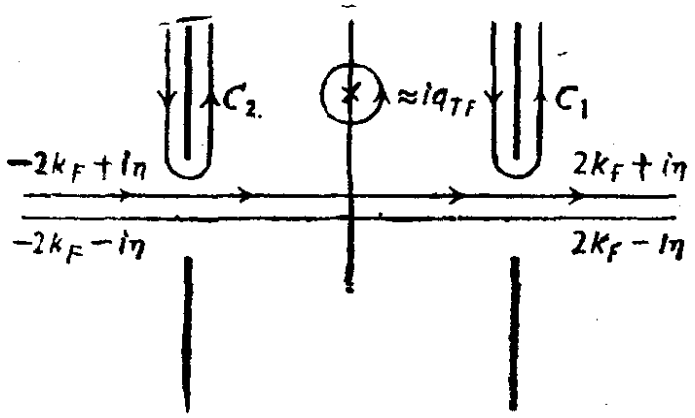


图 14.1 $\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r$ 的渐近计算所用的迴路.

这里 Δ 表示割线右边的周相值减去左边的周相值. 由于被积函数中的下降指数函数，被积函数中所有缓慢变化的函数都可用它们在割线起始点的值代替. 这样，我们有

$$\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r \underset{x\to\infty}{\sim} \frac{Ze}{4\pi^2 ix}\lim_{\eta\to 0}\left(\int_{C_1}+\int_{C_2}\right) qdqe^{iqx}\left(q^2\left\{q^2 + q_{TF}^2\left[\frac{1}{2} - \frac{k_F}{2q}\left(1-\frac{q^2}{4k_F^2}\right)\frac{1}{2}\log\frac{(q-2k_F)^2+\eta^2}{(q+2k_F)^2+\eta^2}\right]\right\}^{-1} - 1\right)$$

$$\underset{x\to\infty}{\sim}\frac{Ze}{4\pi^2 ix}\lim_{\eta\to 0}\left[\frac{\pi q_{TF}^2}{4k_F}\frac{8k_F^3}{\left(4k_F^2+\frac{1}{2}q_{TF}^2\right)^2}\right.$$

$$\left.\times\left(e^{-2ik_Fx}i\int_\eta^\infty ue^{-ux}du+e^{2ik_Fx}i\int_\eta^\infty ve^{-vx}dv\right)\right], \tag{14.25}$$

这里沿迴路 C_1 我们引入了 $q=2k_F+iv$，沿迴路 C_2 引入了 $q=-2k_F+iu$. 余下的积分都是初等的积分，我们求得

$$\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r\underset{x\to\infty}{\sim}\frac{Ze}{\pi}\frac{2\xi}{(4+\xi)^2}\frac{\cos(2k_Fx)}{x^3}, \tag{14.26 a}$$

$$\xi\equiv\frac{q_{TF}^2}{2k_F^2}, \tag{14.26 b}$$

上式首先由 Langer 和 Vosko[1] 推出. 表示式 (14.26 a) 定性地不同于方程 (14.15) 所预言的，它展示出径向波长为 π/k_F 的长程振荡，和正比于 x^3 的包络. 很显然，$\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r$ 比起 $\delta\rho_{TF}(\mathbf{x})$ 是一个改进，因为前者在计算对外场的响应时体现了相互作用介质的分布函数的影响.

从物理观点来看，起屏蔽作用的电荷中的长程振荡是由尖锐分明的 Fermi 面引起，因为不可能从限制于条件 $q>k_F$ 的波矢集合构成光滑的函数. Friedel[2] 首先提示有这种效应，这样的 Friedel 振荡已在稀释合金中作为核磁共振线加宽而被观察到[3]. 在稀释磁性合金中也出现类似的效应；这时传导电子在磁性杂质之间引起一个间接的相互作用，其形式为 $x_{ij}^{-3}\times$

1) J. S. Langer and S. H. Vosko *J. Phys. Chem. Solids*, **12**: 196 (1960).

2) J. Friedel *Phil. Mag.*, **43**: 153 (1952); *Nuovo Cimento*, **7**: 287, *Suppl.* 2 (1958).

3) N. Bloembergen and T. J. Rowland, *Acta Met.*, **1**: 731 (1953); T. J. Rowland, *Phys. Rev.* **119**: 900 (1960); W. Kohn and S. H. Vosko, *Phys. Rev.* **119**: 912 (1960); 也见 J. M. Ziman 前引书，secs. 5.4 and 5.5.

$\cos(2k_F x_{ij})$，x_{ij} 是杂质的间距.[1] 在低的但是有限的温度下，Fermi 面按能量说在厚度为 $k_B T$ 的范围内轮廓变模糊了，其结果是方程 (14.26 a) 必须乘上因子 $\exp(-2\pi m k_B T x/\hbar^2 k_F)$. 尖锐分明的 Fermi 面的重要性被超导电体的行为所证实，甚至在 $T=0$，超导电体的 Fermi 面也在能量宽度为 $\Delta \ll \epsilon_F^0$ 的范围内轮廓变模糊了 (见第十三章). 在这情况下，屏蔽密度的渐近形式正比于 $x^{-3}\cos(2k_F x)\exp(-k_F x\Delta/\epsilon_F^0)$，完全类似于有限温度下正常金属中的情况[2].

15. 电子气体中的等离子体振荡

我们已指出，在相互作用系统的集体态的准确的激发能处，$\Pi(\mathbf{q},\omega)$ 具有极点，这些集体态是通过密度算符与基态相联系的. 回想起方程 (9.43a) 和 (9.46)，可得

$$\frac{U(q)}{U_0(\mathbf{q})}=\frac{1}{\kappa(\mathbf{q},\omega)}=1+U_0(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q},\omega), \quad (15.1)$$

我们注意到 $\kappa(\mathbf{q},\omega)$ 在这些同样的能量处为零. 按环形近似，方程 (12.50) 表明介电常数 κ_r 有一个明显的零点，它出现在能量转移 ν 为一定而且在长波极限 $q\to 0$，这时

$$\kappa_r(\mathbf{q},\omega)=1-\frac{4\alpha r_s}{3\pi\nu^2}. \quad (15.2)$$

这个量在

$$\nu_{pl}^2=4\alpha r_s(3\pi)^{-1} \quad (15.3)$$

为零. 按有量纲的单位来改写这个表示式 [见方程 (3.20) 到 (3.22)，(12.35) 和 (12.52)]，我们得到一个集体激发模，它就在经典等离子体频率[3]，这频率由下式给出

1) M. A. Ruderman and C. Kittel, *Phys., Rev.*, **96**: 99 (1954).
2) A. L. Fetter, *Phys. Rev.*, **140**: *A*1921 (1965).
3) 经典的等离子振荡在本节末尾讨论.

$$\Omega_{pl}^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}. \tag{15.4}$$

我们将考虑简并电子气体对脉冲式的微扰

$$\varphi^{ex}(\mathbf{x}t) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\varphi_0\delta(t) \tag{15.5}$$

的线性响应，从而较详细地研究这些等离子振荡，脉冲式微扰的 Fourier 变换由下式给出

$$\varphi^{ex}(\mathbf{k}, \omega) = \varphi_0(2\pi)^3\delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}). \tag{15.6}$$

相应的感应电荷密度的扰动成为

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle &= -e(2\pi)^{-4}\int d^3k d\omega e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}e^{-i\omega t}\Pi^R(\mathbf{k}, \omega)\varphi^{ex}(\mathbf{k}, \omega)\\ &= -e\varphi_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}(2\pi)^{-1}\int d\omega e^{-i\omega t}\Pi^R(\mathbf{q}, \omega)\\ &= -e\varphi_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}(2\pi)^{-1}\int d\omega e^{-i\omega t}U_0(\mathbf{q})^{-1}\\ &\quad\times\{[\kappa^R(\mathbf{q}, \omega)]^{-1} - 1\},\end{aligned} \tag{15.7}$$

这表明 Π^R 在复 ω 平面上的奇点也决定了系统的共振频率.

虽然方程 (15.7) 是准确的，我们将只考虑保留环形图解的近似. 在这情况下，$\kappa_r^R(\mathbf{q}, \omega)$ 由方程 (12.24) 和 (14.6) 给出为

$$\kappa_r^R(\mathbf{q}, \omega) = 1 - V(\mathbf{q})\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega), \tag{15.8}$$

其中 [比较方程 (12.29) 和 (14.5)]

$$\begin{aligned}\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega) &= \mathrm{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, \omega) + i\,\mathrm{sgn}\,\omega\,\mathrm{Im}\,\Pi^0(\mathbf{q}, \omega)\\ &= \frac{2}{\hbar}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[\frac{(1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)n_{\mathbf{k}}^0}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} + i\eta}\right.\\ &\quad\left. - \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0(1 - n_{\mathbf{k}}^0)}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} + i\eta}\right]\\ &= -\frac{2}{\hbar}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[\frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 - n_{\mathbf{k}}^0}{\omega - (\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}}) + i\eta}\right],\end{aligned} \tag{15.9}$$

这里 $n_{\mathbf{k}}^0 = \theta(k_F - k)$. 这样，$\Pi^{0R}$ 与 Π^0 的差别只在于无限小

量 $\pm i\eta$. 集体模的频率和寿命由方程(15.7)中的被积函数的极点决定[1]. 这些极点出现于满足下列方程的 $\Omega_q - i\gamma_q$ 的值

$$1 = V(\mathbf{q})\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \Omega_q - i\gamma_q). \tag{15.10}$$

一般地说，这个方程只能用数值分析来解；但是，如果阻尼是小的 $(\gamma_q \ll \Omega_q)$，则实部和虚部分开，我们求得

$$1 = V(\mathbf{q})\mathrm{Re}\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \Omega_q) = V(\mathbf{q})\mathrm{Re}\Pi^{0}(\mathbf{q}, \Omega_q), \tag{15.11}$$

$$\gamma_q = \mathrm{Im}\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \Omega_q)\left[\frac{\partial \mathrm{Re}\,\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\Omega_q}\right]^{-1}$$

$$= \mathrm{sgn}\Omega_q\,\mathrm{Im}\,\Pi^{0}(\mathbf{q}, \Omega_q)\left[\frac{\partial \mathrm{Re}\Pi^{0}(\mathbf{q}, \omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\Omega_q}\right]^{-1}. \tag{15.12}$$

方程(15.11)决定集体模的色散关系 Ω_q，而方程(15.12)给出阻尼常数的显式. 实部和虚部的近似分开，在长波情况将被证明是正确的，现在就 $q \to 0$ 考虑 Π^{0R} 的展开式.

虽然有可能就小的 q 展开方程(12.36)，我们将不这样作而直接用方程(15.9). 在这表示式的第一项中作简单的变数变换就把积分化为

$$\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{2}{\hbar}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}n_k^0\left[\frac{1}{\omega - (\omega_k - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) + i\eta}\right.$$

$$\left. - \frac{1}{\omega - (\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_k) + i\eta}\right]$$

$$= \frac{2q^2}{m}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}n_k^0$$

$$\times \frac{1}{(\omega - \hbar\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}/m + i\eta)^2 - (\hbar q^2/2m)^2}. \tag{15.13}$$

很清楚，如 $|\omega| > \hbar k_F q/m + \hbar q^2/2m$，则 $\mathrm{Im}\Pi^{0R} = 0$；在 q-ω 平面的这个区域内，$\mathrm{Re}\Pi^{0R} = \mathrm{Re}\Pi^{0}$ 可以作为 q 的升幂级数算

1) 一般地说，Π^R 在复 ω 平面实轴的紧下方也有一个割线，其不连续量正比于 $\mathrm{Im}\Pi^R(\mathbf{q},\omega)$ (见，例如图12.9). 但是，当 $t\to\infty$，这割线对方程(15.7)的贡献可忽略；因此，这里起主导作用的长时间行为来自集体模，而在现在的近似下，这模是无阻尼的.

出．算到 q^4 数量级，我们有

$$\mathrm{Re}\Pi^{0\mathrm{F}}(\mathbf{q},\omega)=\frac{2q^2}{m\omega^2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}n_k^0\left[1+\frac{2\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{m\omega}+3\left(\frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{m\omega}\right)^2+\cdots\right]$$

$$=\frac{k_F^3}{3\pi^2}\frac{q^2}{m\omega^2}\left[1+\frac{3}{5}\left(\frac{\hbar k_F q}{m\omega}\right)^2+\cdots\right],\quad(15.14)$$

这是由于

$$2\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}n_k^0=\frac{N}{V}=\frac{k_F^3}{3\pi^2},\quad(15.15)$$

以及在 Fermi 分布下 k^2 的平均值是 $\frac{3}{5}k_F^2$．色散关系［方程(15.11)］现在成为

$$1=\frac{4\pi ne^2}{m\Omega_q^2}\left[1+\frac{3}{5}\left(\frac{\hbar k_F q}{m\Omega_q}\right)^2+\cdots\right],\quad(15.16)$$

这式可用迭代法解出

$$\Omega_q=\pm\Omega_{pl}\left[1+\frac{9}{10}\left(\frac{q}{q_{\mathrm{TF}}}\right)^2+\cdots\right],\quad(15.17)$$

其中

$$\Omega_{pl}=\left(\frac{4\pi ne^2}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\quad(15.18)$$

是等离子体频率，而 $q_{\mathrm{TF}}=(6\pi ne^2/\epsilon_F^0)^{\frac{1}{2}}$ 是第 14 节引入的 Thomas-Fermi 波数．既然当 $|\Omega_q|>\hbar qk_F/m+\hbar q^2/2m$ 时，$\mathrm{Im}\Pi^{0\mathrm{R}}(q,\Omega_q)$ 为零，这些集体模在长波是无阻尼的．这个结果来自现在的计算所用的近似；计入高级改正后，等离子体振荡在一切波长都有阻尼.[1]

零波长下的共振频率，是经典的等离子体频率，因而与 $\hbar$ 无关．为了阐明这些集体模的物理实质，我们回顾等离子振

1) D. F. DuBois, *Ann. Phys.* (*N. Y.*), **7**: 174 (1959); **8**: 24 (1959).

荡的经典推导[1]. 考虑均匀电子气体；平衡粒子密度 n_0 必须等于正电背景密度 n_b 以保证系统是电中性的. 如果电子密度稍被扰动为

$$n(\mathbf{x}t) = n_0 + \delta n(\mathbf{x}t), \tag{15.19}$$

所造成的未补偿电荷引起电场 $\boldsymbol{\mathscr{E}}$，它满足 Poisson 方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\mathscr{E}}(\mathbf{x}t) = -4\pi e[n(\mathbf{x}t) - n_b] = -4\pi\delta n(\mathbf{x}t). \tag{15.20}$$

牛顿第二定律决定作用在小的(单位)体积元中的电子上的力

$$m\frac{d(n\mathbf{v})}{dt} = m\left[\frac{\partial(n\mathbf{v})}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)(n\mathbf{v})\right] = -en\boldsymbol{\mathscr{E}},$$

或

$$mn_0\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} \approx -en_0\boldsymbol{\mathscr{E}}, \tag{15.21}$$

而连续性方程可写为

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla\cdot(n\mathbf{v}) \approx \frac{\partial\delta n}{\partial t} + n_0\nabla\cdot\mathbf{v} = 0. \tag{15.22}$$

方程 (15.21) 和 (15.22) 已就小量 δn 和 $\mathbf{v}$ 线性化. 方程 (15.22) 的时间导数与 Poisson 方程以及方程(15.21)的散度相结合给出

$$\frac{\partial^2\delta n(\mathbf{x}t)}{\partial t^2} = -n_0\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\mathbf{v}(\mathbf{x}t)$$

$$= \frac{en_0}{m}\nabla\cdot\boldsymbol{\mathscr{E}}(\mathbf{x}t) = -\frac{4\pi n_0e^2}{m}\delta n(\mathbf{x}t),$$

或

$$\frac{\partial^2\delta n(\mathbf{x}t)}{\partial} = -\Omega_{pl}^2\delta n(\mathbf{x}t). \tag{15.23}$$

这样，被扰动的电荷密度以频率 Ω_{pl} 作简谐运动. 注意方程

---

1) L. Tonks and I. Langmuir, *Phys. Rev.*, **33**: 195 (1929).

(15.23) 不包含空间导数，因此并没有质量输运. 这个结果与方程(15.17)这个特定形式相符合，因为群速 $\partial\Omega_q/\partial q$ 在长波为零.

16. 非理想 Fermi 气体中的零声

第 15 节表明带电系统能维持一种密度振荡，其长波色散关系为 $\omega \approx \Omega_{pl}$. 这代表一个真实的集体模，因为作用在位移了的粒子上的恢复力来自局部过剩电荷造成的自洽电场. 那么，中性的 Fermi 系统在 $T = 0$ 是否也有类似的集体模呢? 这个问题是值得讨论的. 下面的讨论表明，排斥的短程粒子间的势，足以保证有这种模存在，至少在一种简单的模型中是如此. 由此所得的密度振荡，当 $q \to 0$ 时表现出具有线性的色散关系 $\omega = c_0 q$，称为零声[1]. 但是，零声在物理上与普通的第一声很不相同，尽管色散关系是类似的 $\omega = c_1 q$. 这两个密度振荡的区别，是由于碰撞所起的作用不同: 只有当系统处于局部热力学平衡态中，普通声才能传播; 这个条件要求，平均粒子碰撞时间 τ 比振荡周期 $2\pi/\omega$ 短得多 (也就是说，$\omega\tau \ll 1$). 与此相反，零声是由邻近粒子之间的相干自洽相互作用所维持的集体模;这样，唯一能发生零声的情况是无碰撞体制，这时 $\omega\tau \gg 1$. 关键的事实是，低温下 Pauli 原理大大限制了可能的粒子间碰撞. 事实上，随着 $T \to 0$, τ 按 T^{-2} 趋于无限大[2]. 在固定频率下，存在一个临界温度，低于这个温度普通声强烈地衰减，而零声则自由地传播. 在 $T = 0$，任何频率的普通声都停止传播，只有零声可发生.

---

1) L. D. Landau, *Sov. Phys. -JETP*, **3**: 920 (1957); **5**: 101 (1957).

2) 这个结果只取决于可用的相空间，这首先由 I. Ia. Pomeranchuk 注意到，见 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **20**: 919 (1950).

在电子气体中，等离子体振荡表现为脉冲微扰的共振响应．完全类似的分析适用于中性 Fermi 系统，这里微扰哈密顿函数可以很一般地写为

$$\hat{H}^{ex}(t) = \int d^3x \hat{n}(\mathbf{x}t) U^{ex}(\mathbf{x}t). \tag{16.1}$$

这里 $U^{ex}(\mathbf{x}t)$ 是与密度相耦合的外加含时间的势．随后的分析完全等同于第 13 节中的分析，线性响应由下式给出

$$\delta\langle \hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle = (2\pi)^{-4}\int d^3k d\omega e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\omega t} \times \Pi^R(\mathbf{k}, \omega) U^{ex}(\mathbf{k}, \omega). \tag{16.2}$$

对脉冲微扰的特例

$$U^{ex}(\mathbf{x}t) = U_0^{ex} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\delta(t), \tag{16.3}$$

简单的计算给出

$$\delta\langle \hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle = U_0^{ex} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}(2\pi)^{-1}\int d\omega e^{-i\omega t} U_0(\mathbf{q})^{-1} \times \{[\kappa^R(\mathbf{q}, \omega)]^{-1} - 1\}, \tag{16.4}$$

与方程 (15.7) 完全类似．波矢为 $\mathbf{q}$ 的共振频率仍然由被积函数的极点所决定，它们出现在推迟的广义介电函数 $\kappa^R(\mathbf{q}, \omega)$ 的零点上．

对 $\kappa(\mathbf{q}, \omega)$ 的最简单近似是，只保留零级的正规极化部份 Π^0；在这情况下，极点出现在下列方程所确定的值 $\Omega_q - i\gamma_q$ 之处，

$$1 = V(\mathbf{q})\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \Omega_q - i\gamma_q). \tag{16.5}$$

我们假设 Ω_q 展示声子的色散关系

$$\Omega_q = c_0 q \tag{16.6}$$

因此当 $q \to 0$，Ω_q/q 之比保持一定．Π^0 的有关极限已在方程 (12.48) 中算出，与此相联系的推迟函数可写作 ($q \to 0$)

$$\Pi^{0R}(q, \omega) = \frac{mk_F}{\pi^2\hbar^2}\left[\frac{1}{2} x \ln\left|\frac{x+1}{x-1}\right| - 1\right.$$

$$-\frac{i\pi}{2}x\theta(1-|x|)\Big], \qquad (16.7)$$

其中 $x=m\omega/\hbar k_F q$. 虚部中的因子 $x=|x|\mathrm{sgn}x$ 反映了从编时函数到推迟函数的改变. 只有当 $|x|>1$，无衰减的模才有可能. 在这情况下，长波色散关系由下式给出

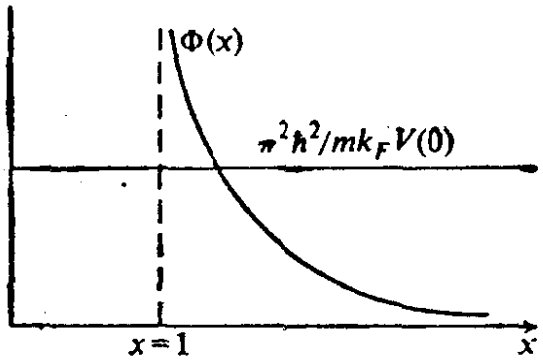


图 16.1 用作图法确定零声色散关系.

$$\lim_{q\to 0}\frac{\pi^2\hbar^2}{mk_F V(q)}=\frac{1}{2}x\ln\left(\frac{x+1}{x-1}\right)-1\equiv\Phi(x), \qquad (16.8)$$

其中

$$x=\lim_{q\to 0}\frac{m\Omega_q}{\hbar k_F q}=\frac{mc_0}{\hbar k_F}=\frac{c_0}{v_F}>1, \qquad (16.9)$$

而 v_F 是 Fermi 速度. 我们看到，只有当 $c_0>v_F$，才可能有零声.

我们把方程 (16.8) 右边的函数记作 $\Phi(x)$；它示意地画于图 16.1. 最有意义的特点是，它在 $x=1$ 的是对数式奇异的. 如果我们假定当 $q\to 0$ 时，$V(q)$ 趋于一个有限常数，则零声速度由 $\Phi(x)$ 和水平线 $\pi^2\hbar^2/mk_F V(0)$ 的交点确定. 很清楚，只有 $V(0)>0$ 时，才有交点. 而 $V(0)>0$ 就是说有一个排斥势，因为 $V(0)=\int d^3x V(\mathbf{x})$. 在这情况下，容易求得弱耦合与强耦合极限下的显式解：弱耦合时，零声速为

$$c_0 \approx v_F\left\{1+2\exp\left[-\frac{2\pi^2\hbar^2}{mk_FV(0)}-2\right]\right\},$$

$$\left(V(0)\ll\frac{\hbar^2}{mk_F}\right). \quad (16.10)$$

强耦合时，零声速为

$$c_0 \approx v_F\left[\frac{V(0)}{3\pi^2(\hbar^2/mk_F)}\right]^{\frac{1}{2}} \approx \left[\frac{k_F^3V(0)}{3\pi^2m}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx [nV(0)m^{-1}]^{\frac{1}{2}}, \quad \left(V(0)\gg\frac{\hbar^2}{mk_F}\right). \quad (16.11)$$

方程（16.10）和（16.11）表明，c_0 按粒子间的势来说是非解析的，因而不能用微扰论求得．确实，对于短程势，这里关于只保留最低级正规极化的近似，不可能在微扰论的基础上证明是合理的．代替这种证明，我们期望 $\Phi(x)$ 在 $x\approx 1$ 的对数奇异性在较实际的近似中也会出现；因此改进的计算将把 c_0/v_F 的数值重正化，但并不改变弱耦合极限下的定性物理现象．这个假定为习题5.8所证实，那里包括了经过挑选的一类高级极化插入图形．

有意义的是，可把方程（16.11）改写为

$$\Omega_q^2 = c_0^2q^2 = \frac{nV(0)q^2}{m}, \quad (16.12)$$

这表明，短程势是重要的．如果当 $q\to 0$，$V(q)$ 是无界的，则色散关系的特征定性地有所不同；在库仑势的特例，$[V(q)=4\pi e^2/q^2]$，方程（16.12）重现第15节得到的等离子体频率．从这观点说，零声和等离子体振荡在物理上非常相似；它们的差别只在于长波色散关系中的细致形式，长波色散关系由 $q\to 0$ 时的 $q^2V(q)$ 的行为所决定．

为了比较，简要地回顾气体中的声波的经典理论．设气体中平衡的质量密度 $\rho_0=mn_0$，经过微小扰动后为

$$\rho(\mathbf{x}t)=\rho_0+\delta\rho(\mathbf{x}t). \quad (16.13)$$

恢复力来自压强的梯度，而牛顿第二定律成为

$$\frac{d(\rho\mathbf{v})}{dt}=\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t}+(\mathbf{v}\cdot\nabla)(\rho\mathbf{v})\approx\rho_0\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}=-\nabla P. \quad (16.14)$$

连续性方程相应地成为［比较方程(15.22)］

$$\frac{\partial\delta\rho}{\partial t}=-\nabla\cdot(\rho\mathbf{v})\approx-\rho_0\nabla\cdot\mathbf{v}, \quad (16.15)$$

这里方程(16.14)和(16.15)两者对有关小量说来都已线性化．这些方程结合起来就给出

$$\frac{\partial^2\delta\rho}{\partial t^2}=\nabla^2P. \quad (16.16)$$

系统具有物态方程$P(\rho,S)$，这把压强与密度和熵相联系．如果熵为恒量，把这个方程按密度的扰动展开到第一级，就求得

$$\nabla^2P=\nabla^2\left[P(\rho_0,S)+\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_s\delta\rho+\cdots\right]$$

$$\approx\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_s\nabla^2\delta\rho. \quad (16.17)$$

因此$\delta\rho$满足波动方程

$$\frac{\partial^2\delta\rho_m}{\partial t^2}=c_1^2\nabla^2\delta\rho_m, \quad (16.18)$$

其中声速由下式给出

$$c_1^2=\left(\frac{\partial P}{\partial\rho_m}\right)_s, \quad (16.19)$$

下标m表明是质量密度．这里，熵恒定的限制意味着过程是绝热的，当压缩波在系统中传播时，没有热量的传递．对于处在基态$(S=0)$的理想 Fermi 气体，方程(14.16)给出

$$c_1=\left(\frac{\partial P}{\partial\rho_m}\right)^{\frac{1}{2}}=\frac{\hbar k_F}{\sqrt{3}\,m}=\frac{v_F}{\sqrt{3}}. \quad (16.20)$$

比较方程(16.10)和(16.20)表明，在弱耦合极限下，

$$c_0=\sqrt{3}\,c_1. \quad (16.21)$$

根据 Landau 的 Fermi 液体理论[1]，一般的分析表明：对于一切的耦合强度，c_0 介于第一声速和第一声速的 $\sqrt{3}$ 倍之间；而对于强耦合，这两个速度近似相等．现在，关于液体 He^3 中的零声已有明确的证据，而液体 He^3 是强相互作用系统．实验指出[2] $(c_0 - c_1)/c_1 \approx 0.03$，与理论估计很好地符合．Landau 理论还使得可以详细地研究零声和第一声的衰减；实验完全证实这些预言．

17. 非弹性的电子散射[3]

其次，我们研究原子核和金属之类的系统对电子的非弹性散射．为简单起见，我们只保留在电子和靶中的带电粒子之间的库仑相互作用

$$\hat{H}^{ex} = -e^2 \int\int \frac{\hat{\rho}_{el}(\mathbf{x}')\hat{\rho}(\mathbf{x})\, d^3x d^3x'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \qquad (17.1)$$

本节自始至终把靶的电荷密度算符记作 $e\hat{\rho}(\mathbf{x})$，因为在原则上，$\hat{\rho}(\mathbf{x})$ 可以不同于粒子密度算符 $\hat{n}(\mathbf{x})$（例如，在有许多过量中子的重原子核中）．精细结构常数的数值是很小的 $(e^2/\hbar c \approx 1/137)$，这使我们可用 Born 近似来分析散射过程．电子从初始的平面波态 $|\mathbf{k}s\rangle$（s 表示自旋投影）散射到终态即平面波态 $|\mathbf{k}'s'\rangle$ 的矩阵元，就是初态和终态的电子波函数

---

1) L. D. Landau 前引文; A. A. Abrikosov and I. M. Khalatnikov, *Rep. Prog. Phys.* **22**: 329 (1959); J. Wilks, "The Properties of Liquid and Solid Helium," ch. 18, Oxford University Press, Oxford, 1967.

2) B. E. Keen, P. W. Matthews, and J. Wilks, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A284**: 125 (1965); W. R. Abel, A. C. Anderson, and J. C. Wheatley, *Phys. Rev. Letters*, **17**: 74 (1966).

3) 关于电子被核子散射的详细说明可看 T. deForest and J. D. Walecka Electron Scatter.ing and Nuclear Structure in *Advan. Phys.* **15**:1 (1966).

的重叠部份[1]

$$\langle \mathbf{k}'s' | \hat{\rho}_{el}(\mathbf{x}') | \mathbf{k}s \rangle = \frac{1}{\Omega} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} u_{s'}^{\dagger}(\mathbf{k}') u_s(\mathbf{k}), \quad (17.2)$$

其中 u 是电子的 Dirac 波函数，Ω 是归一化体积，并引入了电子传递的三维动量

$$\hbar\mathbf{q} \equiv \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (17.3)$$

在非弹性电子散射实验中，三维动量传递和（正的）能量损失为

$$\hbar\omega \equiv (k - k')\hbar c \geqslant 0 \quad (17.4)$$

可以独立地改变，唯一的限制是四维动量传递应为正的，

$$k_\mu^2 \equiv (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 - (k - k')^2 = 4kk'\sin^2\left(\frac{1}{2}\theta\right) \geqslant 0,$$

或

$$\mathbf{q}^2 - \omega^2 c^{-2} \geqslant 0, \quad (17.5)$$

这里我们假定了超相对论性电子，它的 $\varepsilon = \hbar k c$，而 θ 是电子散射角. 用下列关系式

$$\int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \hat{\rho}(\mathbf{x}) d^3x d^3x' = \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2} \hat{\rho}(-\mathbf{q}), \quad (17.6)$$

$$\hat{\rho}(-\mathbf{q}) \equiv \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \hat{\rho}(\mathbf{x}) d^3x, \quad (17.7)$$

未极化的靶的电子散射截面可写成

$$d^2\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{2} \sum_s \sum_{s'} \sum_n \delta[\hbar\omega - (E_n - E_0)]$$
$$\times |\langle \Psi_n | \hat{\rho}(-\mathbf{q}) | \Psi_0 \rangle|^2 \frac{\Omega d^3k'}{(2\pi)^3} \left(\frac{4\pi}{\mathbf{q}^2}\right)^2 \left(\frac{e^2}{\Omega}\right)^2$$
$$\times |u_{s'}^{\dagger}(\mathbf{k}') u_s(\mathbf{k})|^2 \left(\frac{c}{\Omega}\right)^{-1}, \quad (17.8)$$

---

1) 例如，见 L. I. Schiff, "Quantum Mechanics," 3d ed., ch. 13, McGraw-Hill Book Company, New York, (1968).

这是从 Fermi 的“黄金规则”以及入射电子流 c/Ω 得来的. 在方程 (17.8) 中，态 $|\Psi_0\rangle$ 和 $|\Psi_n\rangle$ 是靶粒子的准确 Heisenberg 本征态. 在超相对论极限下，对自旋求和可用下列关系式[1]计算

$$\frac{1}{2}\sum_{s}\sum_{s'}|u_{s'}^{\dagger}(\mathbf{k})u_s(\mathbf{k})|^2=\cos^2\left(\frac{1}{2}\theta\right),$$

我们求得[2]

$$\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\sigma}{d\Omega' d\epsilon'}=\sum_n|\langle\Psi_n|\hat{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle|^2\times\delta[\hbar\omega-(E_n-E_0)],\tag{17.9}$$

$$\sigma_M\equiv\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{4k'^2}{\mathbf{q}^4}\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\underset{\mathbf{q}^2\gg\omega^2/c^2}{=}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{\cos^2(\theta/2)}{4k^2\sin^4(\theta/2)}.\tag{17.10}$$

在本节的余下部分，我们只考虑非弹性散射 (即 $\omega>0$)；在这情况下，方程 (17.9) 中的算符 $\hat{\rho}$ 可用密度涨落算符

$$\tilde{\rho}\equiv\hat{\rho}-\langle\Psi_0|\hat{\rho}|\Psi_0\rangle\tag{17.11}$$

来代替而不改变结果. 因此，可把方程 (17.9) 的右边改写为

$$\sum_n|\langle\Psi_n|\tilde{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle|^2\delta[\hbar\omega-(E_n-E_0)]$$

$$=\sum_n\langle\Psi_0|\tilde{\rho}^{\dagger}(-\mathbf{q})|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\tilde{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle\times\delta[\hbar\omega-(E_n-E_0)]\tag{17.12 a}$$

$$=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\sum_n\langle\Psi_0|\tilde{\rho}^{\dagger}(-\mathbf{q})|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\tilde{\rho}(-\mathbf{q})\Psi_0\rangle\times\frac{1}{\hbar\omega-(E_n-E_0)+i\eta}\tag{17.12 b}$$

---

1) 这个关系式是从 L. I. Schiff，前引书，方程 (52.17) 所给的波函数而来.

2) 方程(17.9)右边定义了动力结构因子 $S(\mathbf{q},\omega)$，这是一个常用的记号.

$$= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left\{\sum_n\left[\frac{\langle\Psi_0|\tilde{\rho}^\dagger(-\mathbf{q})|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\tilde{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-(E_n-E_0)+i\eta}\right.\right.$$

$$\left.\left.-\frac{\langle\Psi_0|\tilde{\rho}^\dagger(\mathbf{q})|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\tilde{\rho}(\mathbf{q})|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega+(E_n-E_0)\mp i\eta}\right]\right\}. \qquad (17.12\,c)$$

方程 (17.12 c) 等价于方程 (17.12 b)，因为如果 $\omega>0$，括号里的最后一项没有虚部. 如果基态在坐标旋转下不变，方程 (17.12 c) 中的两个分子是相等的，因为这时对于固定的 E_n 就 n 求和必然正好产生一个 $\mathbf{q}^2$ 的函数. 以后我们将假定情况正是这样的. 注意，在 $\omega=0$ 时，方程 (17.12) 的右边为零，这就不包括弹性贡献.

按这样的方法，我们得到重要结果[1]

$$\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\sigma}{d\Omega' de'}=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega), \qquad (17.13\,a)$$

$$\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\Omega}{d\Omega' de'}=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Pi^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega), \qquad (17.13\,b)$$

这里我们定义了靶的一般的极化传播函数[2]

$$i\hbar\Pi(x,y)\equiv\langle\Psi_0|T[\tilde{\rho}_H(x)\tilde{\rho}_H(y)]|\Psi_0\rangle, \qquad (17.14\,a)$$

$$i\hbar\Pi(x,y)\equiv\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\int\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}\int\frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\times e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}e^{-i\omega(t_x-t_y)}e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{y}}i\hbar\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q}';\omega), \qquad (17.14b)$$

这些表式既适合于均匀系也适合于非均匀系(例如，有限的原子核)，还定义了相应的推迟函数

$$i\hbar\Pi^{\mathrm{R}}(x,y)=\theta(t_x-t_y)\langle\Psi_0|[\tilde{\rho}_H(x),\tilde{\rho}_H(y)]|\Psi_0\rangle. \qquad (17.15)$$

方程 (17.13 a) 可以立即验证，这只要把方程 (17.14 b) 的 Fourier 变换倒转过来并置 $\mathbf{q}=\mathbf{q}'$，给出

---

1) W. Czyż and K. Gottfried, *Ann. Phys.* (N. Y.), **21**: 47 (1963).

2) 在本节我们一直删掉了归一化因子 $[\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle]^{-1}$.

$$\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega)=\sum_n\Big[\langle\Psi_0|\tilde{\rho}^{\dagger}(-\mathbf{q})|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\tilde{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle$$

$$\times\left(\frac{1}{\hbar\omega-(E_n-E_0)+i\eta}\right.$$

$$\left.-\frac{1}{\hbar\omega+(E_n-E_0)-i\eta}\right)\Big]. \qquad (17.16)$$

方程 (17.13 b) 随之而来，因为 $\Pi^{R}(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega)$ 与方程 (17.16) 不同之处，只是最后一项分母中有 $+i\eta$. 均匀系中的动量守恒简化了这些结果；比较方程 (17.12) 和方程 (7.55) 的等价式子，我们求得 $\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q}';\omega)=V\delta_{\mathbf{qq}'}\Pi(\mathbf{q},\omega)$，式中 $\Pi(\mathbf{q},\omega)$ 是在坐标差 $\mathbf{x}-\mathbf{y}$ 的空间中的 Fourier 变换，而 V 是靶的体积. 因此有

$$\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\sigma}{d\Omega' de'}=-\frac{V}{\pi}\,\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q},\omega)$$

$$=-\frac{V}{\pi}\,\mathrm{Im}\Pi^{R}(\mathbf{q},\omega)\quad(\text{均匀系}). \qquad (17.17)$$

注意，对于延展系统，单位体积(或每个靶粒子)的截面才是有意义的量.

因此，非弹性电子散射直接度量极化传播函数的虚部；但是，虚部的完整知识是充分的，因为这函数本身立即可从方程 (17.16) 得到，

$$\begin{cases}\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega)=\dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_0^{\infty}\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega')\left(\dfrac{1}{\hbar\omega'-\hbar\omega-i\eta}\right.\\ \qquad\left.+\dfrac{1}{\hbar\omega'+\hbar\omega-i\eta}\right)d(\hbar\omega')\\ \Pi^{R}(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega)=\dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_0^{\infty}\mathrm{Im}\Pi^{R}(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega')\left(\dfrac{1}{\hbar\omega'-\hbar\omega-i\eta}\right.\\ \qquad\left.+\dfrac{1}{\hbar\omega'+\hbar\omega+i\eta}\right)d(\hbar\omega').\end{cases} \qquad (17.18)$$

有可能直接从方程(17.9)和(17.13)构造出求和规则，因为我们注意到

$$\int_0^\infty \hbar d\omega \left(\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\sigma}{d\Omega' de'}\right) = -\frac{\hbar}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega)d\omega$$
$$= \langle\Psi_0|\tilde{\rho}^\dagger(-\mathbf{q})\tilde{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle$$
$$= \langle\Psi_0|\hat{\rho}^\dagger(-\mathbf{q})\hat{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle$$
$$- |\langle\Psi_0|\hat{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle|^2. \qquad (17.19)$$

由此可见：总的非弹性积分截面，直接决定了基态的均方密度涨落．详细地写出方程(17.19)中的算符，我们有

$$\langle\Psi_0|\tilde{\rho}^\dagger(-\mathbf{q})\tilde{\rho}(-\mathbf{q})|\Psi_0\rangle$$
$$= \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{y})|\Psi_0\rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}d^3xd^3y$$
$$- \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})|\Psi_0\rangle$$
$$\times \langle\Psi_0|\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{y})|\Psi_0\rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}d^3xd^3y. \qquad (17.20)$$

正则对易关系式立即给出

$$\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{y})$$
$$= \delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{y})$$
$$+ \hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{y})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}) \qquad (17.21)$$

以及

$$\int d^3x\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}) = \hat{Z}, \qquad (17.22)$$

这里的$\hat{Z}$的本征值是靶内带电散射体的总数．这样，可写出

$$-\frac{\hbar}{\pi}\int_0^\infty d\omega\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega)$$
$$= Z + \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}g(\mathbf{x},\mathbf{y})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}d^3xd^3y, \qquad (17.23\,a)$$

$$g(\mathbf{x},\mathbf{y}) \equiv \langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{y})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})|\Psi_0\rangle$$
$$- \langle\Psi_0|\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})|\Psi_0\rangle$$
$$\times \langle\Psi_0|\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{y})|\Psi_0\rangle. \qquad (17.23\,b)$$

函数 $g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 是基态中的两粒子相关性的量度. 对均匀介质的特例，$g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)$，则有

$$-\frac{V\hbar}{\pi}\int_0^\infty d\omega \,\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q}, \omega)$$

$$= Z + V\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{z}} g(\mathbf{z}) d^3z \quad (\text{均匀系统}). \qquad (17.24)$$

对于无相互作用的 Fermi 气体，可以算出方程 (17.23b) 中的矩阵元 (习题 5.10)，这给出

$$g^0(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) = -\frac{1}{2}\rho_0^2\left[\frac{3j_1(k_F|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)}{k_F|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}\right]^2. \qquad (17.25)$$

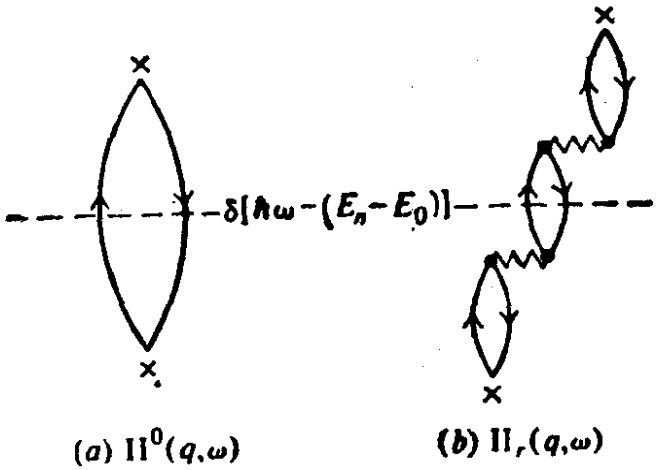


图 17.1 $\mathrm{Im}\Pi$ (a) 在理想 Fermi 气体中，(b) 在环近似下算.

这样，如 q 很大，方程 (17.23 a) 中的积分由于指数函数的振荡而变得很小. 在相互作用的系统中，预期也有这同样的行为，因此可写出

$$\lim_{q\to\infty}\left[-\frac{\hbar}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q}, \mathbf{q}; \omega)d\omega\right] = Z. \qquad (17.26)$$

在这极限下，从作为散射体的粒子来看，正好有 Z 个单个的电荷[1]. 注意由于方程 (17.5) 的限制，这个极限提供唯一真正有

1) 在这讨论中，我们始终假定靶的粒子是没有内在结构的.

意义的式子[除非由于某种原因，对于 $\omega/c > q$，$\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q}, q; \omega)$ 是小的].

我们讨论这些结果的三个很简短的应用. 讨论中采用的近似为，用一个等价的均匀介质来代替靶，其正确的密度和带电散射体的总数由关系式

$$\frac{Z}{V} = \rho_0 = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \tag{17.27}$$

定出. 对 Π^0 的最简单近似就是图 17.1 a 所示的 Π^0. 图解的虚部只保留中间态能量守恒的过程 [见方程 (17.12 a)]. 这样，在这个简单模型中，非弹性散射就是产生粒子空穴对，或等价地说，从 Fermi 海中逐出一个粒子. 在这情况下可写出

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\sigma}{d\Omega' d\varepsilon'} &= -\frac{V}{\pi}\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q}, \omega) \\ &= -\frac{3\pi Z}{k_F^3}\mathrm{Im}\Pi(\mathbf{q}, \omega) \\ &\approx \frac{3Z}{8\varepsilon_F^0}\left[-\frac{4\pi\hbar^2}{mk_F}\mathrm{Im}\Pi^0(\mathbf{q}, \omega)\right],\end{aligned} \tag{17.28}$$

这是由方程 (12.40) 到 (12.48 a) 所给出的，且示于图 12.9. 这个谱的特点称为准弹性峰. 如果 $q/k_F > 2$，在终态并不存在 Pauli 原理的限制，因而图 12.9 中的曲线的极大值出现在

$$\hbar\omega_{\max} = \frac{\hbar^2\mathbf{q}^2}{2m} \tag{17.29}$$

[见方程(12.41)]. 方程 (17.29) 不过是传递到本来是静止的单个靶粒子上的能量和动量之间的运动学关系式. 准弹性峰的宽展是由于靶中核子的 Fermi 运动，其半宽度是 Fermi 动量的直接量度. 图 17.2 表示理论与 Ca^{40} 中电子散射数据的比较.

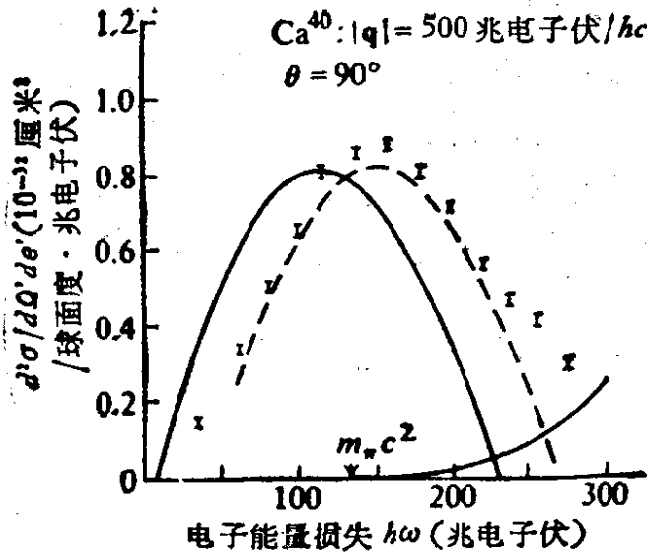


图 17.2 Ca^{40} 的准弹性峰. [P. Zimmerman, Standford University Ph. D. Thesis, 1969 (未发表).] 理论曲线是在无相互作用的 Fermi 气体模型中，应用实验得出的核子之间相对论性电磁相互作用而算出的. [E. Moniz, *Phys. Rev.*, **184**: 1154(1969).] 虚线是假定每个核子有平均的单粒子束缚能−35 兆电子伏而得到的. Fermi 波数取为 $k_F = 235$兆电子伏/$\hbar c = 1.19\times10^{13}$ 厘米$^{-1}$. 右下边的实数是π介子生成的理论估计.

作为第二个例子，考虑把图 17.1b 的环形图解求和而算出的极化传播函数. 在用 $\Pi_r(\mathbf{q}, \omega)$ 的虚部时，我们计入粒子-空穴对通过相互作用系集的传播

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,\Pi_r(\mathbf{q},\omega)\\
&=-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{[U_0(\mathbf{q})]^{-1}\left[\frac{1}{\kappa_r(\mathbf{q},\omega)}-1\right]\right\}\\
&=-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{[U_0(\mathbf{q})]^{-1}\left[\frac{1}{1-U_0(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q},\omega)}-1\right]\right\}\\
&=\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Pi^0(\mathbf{q},\omega)\right]\{[1-U_0(\mathbf{q})\mathrm{Re}\Pi^0(\mathbf{q},\omega)]^2\\
&\quad+[U_0(\mathbf{q})\mathrm{Im}\Pi^0(\mathbf{q},\omega)]^2\}^{-1}. \qquad (17.30)
\end{aligned}
$$

这个改进了的近似，把准弹性峰保持在同一个运动学区域中，那里 $\mathrm{Im}\Pi^0(\mathbf{q},\omega)\neq 0$，但是峰内的强度作了重新分布.

除了准弹性峰以外，在系统的分立的集体激发处也存在峰. 对于在能量 $\hbar\omega=\hbar\omega_{rcs}$ 的孤立共振峰，积分强度给出非弹性散射的形状因数的绝对值

$$\hbar\int_{\text{遍及共振峰}} d\omega\left(\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\sigma}{d\Omega' d\varepsilon'}\right)=|F_{n0}(\mathbf{q})|^2, \qquad (17.31)$$

式中

$$F_{n0}(\mathbf{q})\equiv\rho_{n0}(-\mathbf{q})=\int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\langle\Psi_n|\hat{\rho}(\mathbf{x})|\Psi_0\rangle d^3x.$$

对固定能量损耗 $\hbar\omega_{rcs}$，现在可以就一切 $\mathbf{q}^2$ 值（仍然限于 $\mathbf{q}^2\geqslant\omega_{rcs}^2/c^2$）测量非弹性形状因数，这使我们可以详细地定出跃迁电荷密度的 Fourier 变换. 把这个关系式逆转过来，可得到跃迁电荷密度本身的空间分布[1]. 例如，在均匀电子气体是一个好的模型的范围内，金属中等离子体振荡电子激发的截面[2] 由下式给出［见方程 (15.8)、(15.10) 到 (15.12) 和 (17.17)］

$$\frac{1}{Z}\frac{1}{\sigma_M}\frac{d^2\sigma}{d\Omega' d\varepsilon'}=\frac{4}{3\pi^2}\frac{(\varepsilon_F^0)^3}{(\hbar\Omega_{pl})^4}\left(\frac{q}{k_F}\right)^4 \times\left[-\frac{\hbar^2}{2mk_F}\frac{\partial\mathrm{Re}\Pi^0(\mathbf{q},\omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\Omega_q}\right]^{-1} \times\frac{\gamma_q}{(\omega-\Omega_q)^2+\gamma_q^2}, \qquad (17.32)$$

这里 Z 是传导电子数. 这散射截面在能量损耗为 $\hbar\Omega_{pl}$ 处有

1) 对于不连续态之间的跃迁，$F_{n0}(\mathbf{q})$ 的周相可由时间反演不变性定出. (见 T. de Forest. and J. D. Walecka. 前引文，附录 B).

2) 这个结果忽略了入射电子与金属中电子之间的交换散射. 它还假定等离子体振荡的阻尼小；但是，方程 (17.32) 中的积分强度

$$\gamma_q\int_0^\infty d\omega[(\omega-\Omega_q)^2+\gamma_q^2]^{-1}\approx\pi$$

与阻尼无关.

一个尖锐的峰，其宽度为 $\hbar\gamma_q$. 这样的效应已在电子穿过金属薄膜的透射中观察到[1]. 很类似的处理可描述非弹性的中子散射，如习题 5.13 所表明.

习　　题

5.1　考虑一个自旋为 s 的无相互作用的均匀费米子系统. 试化简推迟密度相关函数

$$iD^{R}(x,x')=\theta(t-t')\langle\Psi_0|[\tilde{n}_H(x),\tilde{n}_H(x')]|\Psi_0\rangle/\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle$$

成为定积分. 研究下列极限:

(a)　$t=t'$，一切 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x}'$;

(b)　$\mathbf{x}=\mathbf{x}'$，　$t-t'\ll\hbar\epsilon_F^{-1}$;

(c)　$\mathbf{x}=\mathbf{x}'$，　$t-t'\gg\hbar\epsilon_F^{-1}$.

并解释各项的意义.

5.2　保留方程 (14.25) 中的第一级改正，试推导渐近展开式[比较方程 (14.26)]

$$\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r\sim\frac{Ze}{\pi}\frac{2\xi}{(4+\xi)^2}\frac{k_F^2}{x}\left\{\frac{\cos 2k_Fx}{(k_Fx)^2}-\frac{\sin 2k_Fx}{(k_Fx)^3}-\frac{2}{4+\xi}\right.$$
$$\left.\times\left[\xi\ln 4k_Fx-3+\xi\left(\gamma-\frac{1}{4}\right)\right]\right\},$$

式中 $\gamma=0.577\cdots$ 是 Euler 常数，其余的贡献随 $x\to\infty$ 比 x^4 更快地趋于零[2].

5.3　试按下列方法推导原子序数为 Z 的中性原子的势和电子电荷分布的 Thomas-Fermi 方程:

(a)　用流体力学静态平衡方程[方程(14.17)]和 $r\to\infty$

---

1) 与实验结果的比较，见 D. Pines and P. Noziès "The Theory of Quantum Liquids" Vol. I, sec. 4.4, W. A. Benjamin, Inc., New York. 1966.

2) 正比于 $\ln k_F$ 的贡献是 J. S. Langer 和 S. H. Voske 得出的，见 *J. Phys. Chem. Solids*, **12**: 196 (1960)，但他们没有保留所有常数项.

的边界条件证明静电势 $\varphi(r)=(1/e)(\hbar^2/2m)[3\pi^2 n(r)]^{\frac{2}{3}}$.

(b) 从Poisson 方程和问题中的物理情况证明：$\varphi(r)$ 满足 $\nabla^2\varphi=\kappa\varphi^{\frac{3}{2}}$ 及边界条件 $\varphi(0)\approx Ze/r$，而当 $r\to\infty$ 时，$r\varphi(r)\to 0$，这里 κ 是一个常数，其定义为 $\kappa=(8\sqrt{2}/3\pi a_0^2)(e/a_0)^{-\frac{1}{2}}$. (注意：$a_0=\hbar^2/me^2$ 是 Bohr 半径.)

5.4 试从方程 (12.36) 直接验证等离子体振荡的色散关系 [方程 (15.16) 到 (15.18)].

5.5 试证明，当波矢超过一个临界波矢 $k_{\max}$ 时，等离子体振荡被阻尼，$k_{\max}$ 由方程 $y^2=(\alpha r_s/\pi)[(2+y)\ln(1+2y^{-1})-2]$ 确定，其中 $y=k_{\max}/k_F$. 并证明当波矢超过一个临界波矢时，零声也被阻尼，这临界波矢在弱耦合极限下由 $y=2e^{-1}\exp[-2\pi^2\hbar^2/mk_F V(0)]$ 给出.

5.6 试把第 16 节的讨论推广到低密度的刚球 Fermi 气体，并证明，长波零声的色散关系由 $\Phi(x)=\pi/4k_F a$ 给出，其中 $x=c_0/v$ [比较方程 (16.8)]. 由此所得的零声速度是怎样的?

5.7 (a) 推广第 12 节的处理，试用 Heisenberg 场算符表出 $i\hbar\Pi_{\alpha\beta,\rho\tau}(x,x')$.

(b) 用习题 3.15 证明：用 $V_0(q)$ 代替 $V(q)$ 后的方程 (16.5) 正确地描述具有 (9.21) 形式的依赖于自旋的相互作用下的零声密度振荡.

(c) 考虑扰动 $\hat{H}^{ex}(t)=\int d^3x\hat{\sigma}(\mathbf{x}t)\cdot\mathbf{U}^{ex}(\mathbf{x}t)$，试证明同一系统可维持自旋波，这波是用 $V_1(q)$ 代换 $V(q)$ 后的方程 (16.5) 描述的.

5.8 (a) 对自旋为 s 的均匀 Fermi 系，其短程势 $V(q)\approx V(0)$ (=常数)，试证明，凡具有重复的跨接在费米子环上的水平相互作用线的一切正规极化插入图形可求和为 $\Pi^*(q)=$

$\Pi^{\star}_{(0)} + \Pi^{\star}_{(1)b} + \cdots = \Pi^{0}(q) \times [1 + \Pi^{0}(q)V(0)/(2s+1)]^{-1}$ (见图 12.1 b 和 12.3 b).

(b) 试证明零声现在由方程 $\Phi(x) = \pi^2\hbar^2/smk_F V(0)$ 描写，其中 $x = c_0/v_F$ [见方程 (16.8)].

(c) 试求出稀薄刚球气体的相应表达式(比较习题5.6[1]).

5.9 定义编时 Green 函数

$$iD_\sigma(x,x') = \langle\Psi_0|T[\hat{\sigma}_{HZ}(\mathbf{x}t)\hat{\sigma}_{HZ}(\mathbf{x}'t')]|\Psi_0\rangle/\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle,$$

式中 $\hat{\sigma}_Z(\mathbf{x}) = \hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x})(\sigma_Z)_{\alpha\beta}\hat{\psi}_{\beta}(\mathbf{x})$，并使 $D_\sigma(x,x')$ 联系于 $\Pi_{\alpha\beta,\lambda\mu}(x,x')$. 试对自旋为 1/2 且势与自旋无关的 Fermi 系，用习题 4.12 a 得出，$D_\sigma(q) = \hbar\Pi^{\star}(q)$. 为什么 D_σ 与 D 不相同?

5.10 试对无相互作用的自旋 1/2 的 Fermi 气体推导两粒子相关函数的表示式 (17.25).

5.11 试对无相互作用的自旋 1/2 的 Fermi 气体算出方程 (17.24) 的求和定则.

5.12 大动量传递 ($q \gg 2k_F$)的准弹性峰 (图 12.9) 的半极大值的宽度是怎样与 Fermi 动量相关的?

5.13 考虑原子或分子的相互作用系集对中子的非弹性散射.

(a) 在中子和自由的靶粒子之间核相互作用可借助于赝势[2] $V(|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}|) = (4\pi a\hbar^2/2m_{\text{red}})\delta(\mathbf{x}_n - \mathbf{x})$ 描述. 假如用 Born 近似处理这个势，则 Born 近似给出靶粒子中的一个对中子的准确的低能 s 波核散射. 在这个表示式中，m_{red} 和 a ($\approx 10^{-13}$ 厘米) 是适当的约化质量和散射长度. 证明这结

1) K. Gottfried and L. Pičman, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat.-Fys. Medd.*, **32**: no. 13 (1960).

2) E. Fermi, *Ricerca Sci.*, **7**: 13 (1936); J. M. Blatt and V. F. Weiskopf, "Theoretical Nuclear Physics," p. 71, John Wiley and Sons, New York, 1952.

果可直接从方程 (11.5)、(11.9) 和 (11.22) 而来.

(b) 从而证明,中子与多体系集的相互作用是

$$\hat{H}^{ex} = (4\pi a\hbar^2/2m_{red})\hat{n}(\mathbf{x}_n).$$

这个哈密顿函数必须用 Born 近似来处理.

(c) 如果准确地处理靶粒子间的原子相互作用,那么第 17 节的讨论应怎样修改以描述非弹性中子散射?

第六章 Bose 系 统

在第5节中，我们看到统计对理想气体低温性质有重要影响．费米子服从不相容原理，它的基态是填满的 Fermi 海．反之，理想 Bose 系统的基态则是所有粒子都处于能量最低的同一个单粒子模．既然理想气体是计算相互作用多粒子系集的性质的基础，玻色子的微扰论的结构，自然与前面所讨论的费米子系统中的很不相同．的确，大规模占据一个单粒子模，提出了一个带根本性的困难，为了得到有确定意义的理论，把问题重新加以表述是至关紧要的．

18. 问题的表述方式

通常形式的微扰论不适用于玻色子，理由如下：N 个玻色子的无相互作用基态是

$$|\Phi_0(N)\rangle = |N, 0, 0, \cdots\rangle, \tag{18.1}$$

这里所有粒子都处于能量最低的模．为确定起见，这里考虑体积为 V 而具有周期边界条件的一个大箱子，这个优先的态的动量为零，但类似的大规模占据也会出现于另外的情况(见第十四章)．如果把零动量模的产生和消灭算符 $a_0^\dagger$ 和 a_0 作用于基态，方程 (1.28) 给出

$$\begin{cases} a_0|\Phi_0(N)\rangle = N^{\frac{1}{2}}|\Phi_0(N-1)\rangle, \\ a_0^\dagger|\Phi_0(N)\rangle = (N \mp 1)^{\frac{1}{2}}|\Phi_0(N+1)\rangle. \end{cases} \tag{18.2}$$

这样，无论 a_0 或 $a_0^\dagger$ 都不能湮灭基态，通常的把算符划分为产生和消灭两部分的办法 (第 8 节) 在这里完全失效．因此，不

可能定义那种基态期待值为零的正规编序乘积，而 Wick 定理的应用变为复杂得多.

将方程 (18.2) 与费米子的相应关系式进行比较，还是有意思的，对于费米子，占据数不能超过 1，任一个单粒子模对整个系统的热力学性质至多贡献数量级为 N^{-1} 的一项. 另一方面，对于 Bose 系统，算符 a_0 和 $a_0^\dagger$ 将基态乘以 $N^{\frac{1}{2}}$ 或 $(N+1)^{\frac{1}{2}}$，这两个数显然是很大的. 由于一般宁愿处理强度变量，我们引入算符

$$\hat{\xi}_0 \equiv V^{-\frac{1}{2}} a_0, \qquad \hat{\xi}_0^\dagger \equiv V^{-\frac{1}{2}} a_0^\dagger, \tag{18.3}$$

它们具有下列性质

$$[\hat{\xi}_0, \hat{\xi}_0^\dagger] = V^{-1}, \tag{18.4}$$

$$\begin{cases} \hat{\xi}_0 |\Phi_0(N)\rangle = \left(\dfrac{N}{V}\right)^{\frac{1}{2}} |\Phi_0(N-1)\rangle, \\ \hat{\xi}_0^\dagger |\Phi_0(N)\rangle = \left(\dfrac{N+1}{V}\right)^{\frac{1}{2}} |\Phi_0(N+1)\rangle. \end{cases} \tag{18.5}$$

虽然 $\hat{\xi}_0$ 和 $\hat{\xi}_0^\dagger$ 各把 $|\Phi_0\rangle$ 乘以一个有限因子，它们的对易式在热力学极限下 ($N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V \to$ 常数) 都是零. 因此，只要我们只考虑这样的态，粒子总数的一个有限分数占据着模 $\mathbf{k} = 0$ 就允许将算符 $\hat{\xi}_0$ 和 $\hat{\xi}_0^\dagger$ 当 c 数来处理[1]. 这个近似过程明显地忽略了凝聚态中占据数的涨落.

上述讨论含蓄地假定了理想的 Bose 气体，其所有粒子都处于零动量状态. 但是，在有相互作用的系统中，粒子间的势能使优先模上的占据数减少，因而基态期待值为

$$\langle \Psi_0 | \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0 | \Psi_0 \rangle = N_0 V^{-1} \equiv n_0, \tag{18.6}$$

它小于总密度 $n = N/V$. 尽管如此，只要零动量态的粒子数

1) N. N. Bogoliubov, *J. Phys (USSR)*, **11**:23 (1947). 也可见 P. A. M. Dirac "The Principles of Quantum Mechanics", 2d ed., sec. 63, Oxford Press, Oxford, 1935. (P. A. M. 狄拉克：量子力学原理，第三版，陈咸亨译，科学出版社，1979.)

保持为N的一个有限分数，用 c 数代替 $\hat{\xi}_0$ 和 $\hat{\xi}_0^\dagger$ 的 Bogoliubov 代换就在热力学极限下正确地描述了有相互作用的基态. 因此，这导至把玻色子场算符写为

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \xi_0 + \sum_{\mathbf{k}}{}' V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} a_{\mathbf{k}}$$

$$= \xi_0 + \hat{\varphi}(\mathbf{x}) = n_0^{\frac{1}{2}} + \hat{\varphi}(\mathbf{x}) , \qquad (18.7)$$

这里的求和符号上加了撇号，表示略去 $\mathbf{k} = 0$ 的项. 算符 $\hat{\varphi}(\mathbf{x})$ 具有非零动量分量，而 ξ_0 是恒定的 c 数.

将 $\hat{\psi}$ 分成两部份，这从根本上修改了哈密顿函数. 考察势能

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\times \hat{\psi}(\mathbf{x}')\hat{\psi}(\mathbf{x}). \qquad (18.8)$$

如果将方程 (18.7) 代入方程 (18.8)，所得的项可按因子 $n_0^{1/2}$ 的个数来分类，于是相互作用哈密顿函数分成八个不同的部份:

$$E_0 = \frac{1}{2} n_0^2 \int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \qquad (18.9)$$

$$\hat{V}_1 = \frac{1}{2} n_0 \int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \qquad (18.10)$$

$$\hat{V}_2 = \frac{1}{2} n_0 \int d^3x d^3x' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \qquad (18.11)$$

$$\hat{V}_3 = 2\left(\frac{1}{2} n_0\right)\int d^3x d^3x' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \qquad (18.12)$$

$$\hat{V}_4 = 2\left(\frac{1}{2} n_0\right)\int d^3x d^3x' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \qquad (18.13)$$

$$\hat{V}_5 = 2\left(\frac{1}{2} n_0^{\frac{1}{2}}\right)\int d^3x d^3x' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')$$

$$\times V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \qquad (18.14)$$

$$\hat{V}_6 = 2\left(\frac{1}{2}n_0^{\frac{1}{2}}\right)\int d^3x d^3x' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \times \hat{\varphi}(\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \tag{18.15}$$

$$\hat{V}_7 = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}). \tag{18.16}$$

图 18.1 表示相互作用哈密顿函数中所包含的不同过程，其中实线表示不在凝聚态中的粒子（$\hat{\varphi}$ 或 $\hat{\varphi}^\dagger$），波线表示相互作用势 V，而虚线表示属于凝聚态的粒子（ξ_0 或 $\xi_0^\dagger \equiv n_0^{\frac{1}{2}}$）。在导出方程 (18.9) 到 (18.16) 时，我们已用到关系式，

$$\int d^3x\hat{\varphi}(\mathbf{x}) = V^{-\frac{1}{2}}\sum_{\mathbf{k}}{}' a_{\mathbf{k}}\int d^3x e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = V^{-\frac{1}{2}}\sum_{\mathbf{k}}{}' a_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k}0} = 0, \tag{18.17}$$

因此，$\hat{V}$ 不包含只有一个粒子脱离凝聚态的项. 方程 (18.9) 的项 E_0 是一个 c 数，

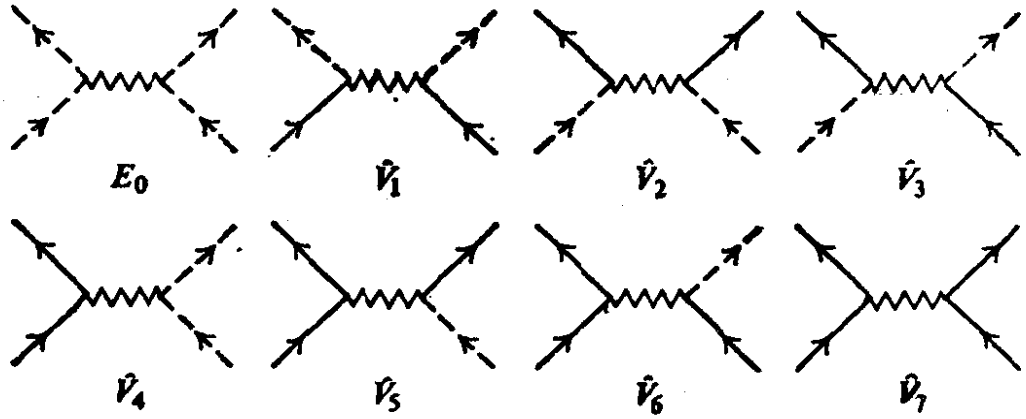


图 18.1　关于玻色子的 $\hat{V}$ 包括的过程.

$$E_0 = \frac{1}{2}V^{-1}N_0^2V(0) = \frac{1}{2}Vn_0^2V(0), \tag{18.18}$$

它仅仅移动了能量的零点，并不具有算符的特性.

在无相互作用系集里，基态由方程 (18.1) 给出，其中 $N_0 = N$. 由于 Bogoliubov 的规定完全消除了算符 a_0 和 $a^\dagger$，

所有剩下的消灭算符就湮灭基态，使它从而成为真空

$$|0\rangle = |\Phi_0\rangle = |N, 0, 0, \cdots\rangle. \tag{18.19}$$

总哈密顿函数的真空期待值完全来自方程 (18.9)，

$$\langle 0|\hat{H}|0\rangle = E_0 = \frac{1}{2} V^{-1}N^2V(0), \tag{18.20}$$

它就是相互作用 Bose 气体的基态能量的第一级改变.

应用方程(18.7)，消除了与零动量态有关的疑问，但是还有如下的困难存在. 考虑粒子数算符

$$\hat{N} = N_0 + \int d^3x \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\varphi}(\mathbf{x})$$

$$= N_0 + \sum_{\mathbf{k}}{}' a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \tag{18.21}$$

其中 N_0 是 c 数. 显然，$\hat{N}$ 不再与总哈密顿函数对易，

$$[\hat{T} + E_0 + \hat{V}_1 + \cdots + \hat{V}_7, \hat{N}] \neq 0, \tag{18.22}$$

因为各种相互作用项改变了不在凝聚态中的粒子数.结果，总粒子数不再是一个运动常数，而必须通过辅助条件

$$N = N_0 + \sum_{\mathbf{k}}{}'\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}\rangle \tag{18.23}$$

来确定，这里尖括号表示相互作用系统的基态期待值. 在第十章，我们将研究这个步骤的一个例子，但是，把整个问题从一开始就换一种表述方式，常常是较为简单的.

因此，我们回到原来的哈密顿函数 $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$，其中 a_0 和 $a_0^\dagger$ 仍是算符. 引入厄密算符

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}, \tag{18.24}$$

它具有本征矢量和本征值的完全集合

$$\hat{K}|\Psi_j\rangle = K_j|\Psi_j\rangle. \tag{18.25}$$

算符 $\hat{K}$ 和 $\hat{N}$ 可对易，因而这个严格的问题分解为总粒子数给定的各个子空间中的问题. 在一个子空间内，基态显然对应

于 $\hat{K}$ 的最低本征值，

$$\hat{K}|\Psi_0(N)\rangle = K(\mu, V, N)|\Psi_0(N)\rangle$$
$$= [E(V, N) - \mu N]|\Psi_0(N)\rangle. \quad (18.26)$$

这些关系式对任意 μ 值都成立. 如果选择一个子空间，其中热力学关系式 (4.3) 成立，

$$\mu = \frac{\partial E(V, N)}{\partial N}, \quad (18.27)$$

则我们将求得 K 的绝对极小

$$\frac{\partial K(\mu, V, N)}{\partial N} = \frac{\partial E(V, N)}{\partial N} - \mu = 0. \quad (18.28)$$

方程 (18.27) 可认为是用变量 μ 和 V 消去 N 的一个关系式. 在这个子空间中，期待值 $\langle\Psi_0|\hat{K}|\Psi_0\rangle$ 是热力学势在绝对温度为零[见方程 (4.7)] 和 μ 和 V 固定时的极小值，

$$\langle\Psi_0(\mu)|\hat{K}|\Psi_0(\mu)\rangle = \Omega(T = 0, V, \mu)$$
$$= (E - \mu N)|_{T=0}. \quad (18.29)$$

因此，按照一般热力学原理，$|\Psi_0(\mu)\rangle$ 代表系集在 $T = 0$，V 和 μ 固定下的平衡态. 第 4 节中所有热力学关系式现在保持不变，例如

$$\left[-\frac{\partial\Omega(T, V, \mu)}{\partial\mu}\right]_{T=0, V} = -\frac{\partial}{\partial\mu}\langle\Psi_0(\mu)|\hat{K}|\Psi_0(\mu)\rangle$$
$$= \langle\Psi_0(\mu)|-\frac{\partial\hat{K}}{\partial\mu}|\Psi_0(\mu)\rangle$$
$$= \langle\Psi_0(\mu)|\hat{N}|\Psi_0(\mu)\rangle$$
$$= N, \quad (18.30)$$

这里我们用到归一化条件 $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1$.

只要 a_0 和 $a_0^\dagger$ 代表算符，$\hat{H}$ 和 $\hat{K}$ 二者都提供相互作用系集可接受的描述. 但是，当我们用 Bogoliubov 规定时，热力学势提供一个确定的优点，因为它使得可以对粒子数不守恒作

自洽处理[1]. 的确，μ 可以解释为体现辅助条件 (18.23) 的 Lagrange 乘子. 因此我们实施下列步骤：

1. 用 c 数代替 $\hat{\xi}_0$ 和 $\hat{\xi}_0^\dagger$

$$\hat{\xi}_0 \to n_0^{1/2} \qquad \hat{\xi}_0^\dagger \to n_0^{1/2}. \tag{18.31}$$

按这方式，$\hat{N}$ 和 $\hat{K}$ 成为

$$\hat{N} \to N_0 + \sum_{\mathbf{k}}{}' a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \equiv N_0 + \hat{N}', \tag{18.32}$$

$$\begin{aligned}\hat{K} &\to E_0 - \mu N_0 + \sum_{\mathbf{k}}{}' (\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{j=1}^{7} \hat{V}_j \\ &\equiv E_0 - \mu N_0 + \hat{K}', \end{aligned} \tag{18.33}$$

这定义了 $\hat{N}'$ 和 $\hat{K}'$.

2. 既然所有其余的消灭算符湮灭无相互作用基态 $|\Phi_0\rangle$，它也可以当作真空

$$|\Phi_0\rangle \to |0\rangle. \tag{18.34}$$

现在 Wick 定理可以应用了，我们也就可利用前面的量子场论的定理.

3. 所有的最终表示式都包含一个额外的参数 N_0，它可以确定如下：由于任何系集在恒定 (T, V, μ) 下的平衡态使热力学势极小，热力学平衡条件成为

$$\left[\frac{\partial \Omega(T=0, V, \mu, N_0)}{\partial N_0}\right]_{V\mu} = 0, \tag{18.35}$$

这是 $N_0(V, \mu)$ 的隐含关系式.

19. Green 函 数

上述步骤 1 和 2 是截然分开的，分别处理它们是方便的.

---

1) N.M.Hugenholtz and D. Pines, Phys, Rev., **116**:489 (1959).

在这一节，我们将引入基于 $\hat{K}'$ 的 Heisenberg 图象，并用准确的单粒子 Green 函数来确定基态的热力学函数. 第 20 节将引入相互作用图象，并导出微扰论中计算 Green 函数的 Feynman 规则.

Bogoliubov 的规定，让我们想到算符

$$\hat{K} = E_0 - \mu N_0 + \hat{K}', \tag{19.1 a}$$

其中

$$\hat{K} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})[T-\mu]\hat{\psi}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{7}\hat{V}_j. \tag{19.1 b}$$

既然 $\hat{K}$ 是厄密的，它具有本征函数完全集合，我们将用 $|\mathbf{O}\rangle$ 表示算符 $\hat{K}$ 的基态. 重要的是要记住，$|\mathbf{O}\rangle$ 不是 $\hat{N}$ 的本征态，因而不同于方程 (18.26) 中引入的态 $|\Psi_0\rangle$. Heisenberg 图象的定义如下：

$$\begin{aligned}\hat{O}_K(t) &= e^{i\hat{K}t/\hbar}\hat{O}_S e^{-i\hat{K}t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{K}'t/\hbar}\hat{O}_S e^{-i\hat{K}'t/\hbar},\end{aligned} \tag{19.2}$$

其中 $\hat{K}$ 的 c 数部份不影响 $\hat{O}_K(t)$ 对时间的依赖关系. 特别是，场算符 $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ 成为

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_K(\mathbf{x}t) &= e^{i\hat{K}'t/\hbar}\xi_0 e^{-i\hat{K}'t/\hbar} + e^{i\hat{K}'t/\hbar}\hat{\psi}(\mathbf{x})e^{-i\hat{K}'t/\hbar} \\ &= \xi_0 + \hat{\varphi}_K(x) = n_0^{1/2} + \hat{\varphi}_K(x),\end{aligned} \tag{19.3}$$

这表明 $\hat{\psi}_K$ 的凝聚部份不依赖于空间和时间. 单粒子 Green 函数完全像第 7 节中那样定义，

$$\begin{aligned}iG(x,y) &= \frac{\langle\mathbf{O}|T\{[\xi_0 + \hat{\varphi}_K(x)][\xi_0^\dagger + \hat{\varphi}_K^\dagger(y)]\}|\mathbf{O}\rangle}{\langle\mathbf{O}|\mathbf{O}\rangle} \\ &= n_0 + n_0^{1/2}\frac{\langle\mathbf{O}|\hat{\varphi}_K(x) + \hat{\varphi}_K^\dagger(y)|\mathbf{O}\rangle}{\langle\mathbf{O}|\mathbf{O}\rangle} \\ &\quad + \frac{\langle\mathbf{O}|T[\hat{\varphi}_K(x)\hat{\varphi}_K^\dagger(y)]|\mathbf{O}\rangle}{\langle\mathbf{O}|\mathbf{O}\rangle},\end{aligned} \tag{19.4}$$

这里对于一切时间顺序，符号因子都是 $+1$.

我们首先证明方程 (19.4) 右边的第二项为零. 这个结果并不能从粒子数守恒得来，因为$|\mathbf{O}\rangle$不是$\hat{N}$的本征态；而我们这里的论证是利用基态的平移不变性. 量$\langle\mathbf{O}|\hat{\varphi}_K^\dagger(x)|\mathbf{O}\rangle$是$\mathbf{k}\neq 0$的矩阵元$\langle\mathbf{O}|a_\mathbf{k}^\dagger|\mathbf{O}\rangle$各乘以$x$的$c$数函数的线性组合. 按定义，动量算符

$$\hat{\mathbf{P}}=\sum_\mathbf{k}\hbar\mathbf{k}a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k}=\sum_\mathbf{k}{}'\hbar\mathbf{k}a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k} \tag{19.5}$$

不具有零动量成份. 因此$\hat{\mathbf{P}}$与$\hat{K}$可对易，这可由直接计算得来，或者根据原来的算符$\hat{a}_0$本身与$\hat{\mathbf{P}}$的可对易性，

$$[\hat{a}_0,\hat{\mathbf{P}}]=0, \tag{19.6}$$

因而 Bogoliubov 代换并不改变系集的平移不变性. 因此$\hat{K}$的每个本征态可用一个确定的动量值来标记，基态对应于$\mathbf{P}=0$:

$$\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{O}\rangle=0. \tag{19.7}$$

关系式

$$[\hat{\mathbf{P}},a_k^\dagger]=\hbar\mathbf{k}a_\mathbf{k}^\dagger \tag{19.8}$$

意味着$a_\mathbf{k}^\dagger$使动量增加$\hbar\mathbf{k}$，而动量本征态的正交性表明

$$\langle\mathbf{O}|a_\mathbf{k}^\dagger|\mathbf{O}\rangle=0\qquad(\mathbf{k}\neq 0), \tag{19.9}$$

因而证明了这样的论断，即$G(x,y)$取形式

$$iG(x,y)=n_0+iG'(x,y) \tag{19.10}$$

$$iG'(x,y)\equiv\frac{\langle\mathbf{O}|T[\hat{\varphi}_K(x)\hat{\varphi}_K^\dagger(y)]|\mathbf{O}\rangle}{\langle\mathbf{O}|\mathbf{O}\rangle}. \tag{19.11}$$

像在方程(18.32)和(18.33)中那样，带撇部份属于非凝聚态. 用 Fourier 变换的通常定义，$\hat{N}$的期待值可写为

$$N=\langle\hat{N}\rangle=N_0+V(2\pi)^{-4}\int d^4q\,iG'(q)e^{iq_0\eta}, \tag{19.12}$$

上式隐含着极限$\eta\to 0^+$. 既然G'通过 Heisenberg 图象中的算符$\hat{K}'$而依赖于μ和N_0，方程 (19.12) 可用来求$N(V,\mu,$

N_0)；换个方式说，这个关系式可倒转过来求 $\mu(V, N, N_0)$.

任何单体算符的基态期待值，可用单粒子 Green 函数表出．一个有意义的例子是动能

$$T = \langle \hat{T} \rangle = V \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m} iG'(q) e^{iq_0\eta}, \quad (19.13)$$

这表明稳定的凝聚态对 T 没有贡献．势能也可定出，但是详细的证明比第 7 节中的复杂．方程 (19.2) 可改写为

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\varphi}_K(x)}{\partial t} = [\hat{\varphi}_K(x), \hat{K}']. \quad (19.14)$$

在热力学极限下，场 $\hat{\varphi}$ 和 $\hat{\varphi}^\dagger$ 遵从正则对易关系式，应用方程 (18.10) 到 (18.16) 和方程 (19.1) 容易算出这对易式．作了一些运算之后，我们求得

$$\int d^3x \hat{\varphi}_K^\dagger(x) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - T + \mu \right) \hat{\varphi}_K(x)$$

$$= 2\hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4 + 2\hat{V}_5 + \hat{V}_6 + 2\hat{V}_7, \quad (19.15)$$

这里 $\hat{V}_1$ 与 $\hat{\varphi}$ 可对易，因此恒抵消．方程 (19.15) 的伴随方程可写为

$$\int d^3x \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - T + \mu \right) \hat{\varphi}_K^\dagger(x) \right] \hat{\varphi}_K(x)$$

$$= 2\hat{V}_1 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4 + \hat{V}_5 + 2\hat{V}_6 + 2\hat{V}_7, \quad (19.16)$$

而它们的平均值成为

$$\frac{1}{2} \int d^3x \left\{ \hat{\varphi}_K^\dagger(x) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - T + \mu \right) \hat{\varphi}_K(x) \right.$$

$$\left. + \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - T + \mu \right) \hat{\varphi}_K^\dagger(x) \right] \hat{\varphi}_K(x) \right\}$$

$$= (\hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4) + \frac{3}{2}(\hat{V}_5 + \hat{V}_6) + 2\hat{V}_7$$

$$= 2\hat{V} - n_0 \frac{\partial \hat{V}}{\partial n_0}, \quad (19.17)$$

其中 $\hat{V}$ 是总的相互作用能量

$$\hat{V} = E_0 + \sum_{j=1}^{7} \hat{V}_j. \tag{19.18}$$

方程 (19.17) 的基态期待值成为

$$\int d^3x \lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}} \lim_{t'\to t+} \frac{1}{2}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - T(\mathbf{x}) + \mu - i\hbar\frac{\partial}{\partial t'} - T(\mathbf{x}') + \mu\right] iG'(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')$$

$$= 2\langle\hat{V}\rangle - n_0\left\langle\frac{\partial\hat{V}}{\partial n_0}\right\rangle, \tag{19.19}$$

从而用 G' 表出了 $\langle\hat{V}\rangle$.

在 $T = 0$ 的热力学势是算符 $\hat{K}$ 的基态期待值

$$\Omega(T = 0, V, \mu, N_0) = \langle\mathbf{O}|\hat{K}|\mathbf{O}\rangle, \tag{19.20}$$

这里假定 $|\mathbf{O}\rangle$ 是归一化的. 热力学平衡条件 (18.35) 保持不变,我们求得

$$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial N_0}\right)_{V\mu} = \frac{\partial}{\partial N_0}\langle\mathbf{O}|\hat{K}|\mathbf{O}\rangle = \left\langle\mathbf{O}\left|\frac{\partial\hat{K}}{\partial N_0}\right|\mathbf{O}\right\rangle = \left\langle\mathbf{O}\left|\frac{\partial\hat{V}}{\partial N_0} - \mu\right|\mathbf{O}\right\rangle = 0. \tag{19.21}$$

因此这个方程提供了化学势的表示式

$$\mu = \left\langle\mathbf{O}\left|\frac{\partial\hat{V}}{\partial N_0}\right|\mathbf{O}\right\rangle, \tag{19.22}$$

但是必须注意，态矢量 $|\mathbf{O}\rangle$ 本身也依赖于 μ 和 N_0. 方程 (19.12)、(19.19) 以及 (19.22) 联立给出

$$E = \langle\hat{T} + \hat{V}\rangle = \frac{1}{2}\mu N + \frac{1}{2}\int d^3x \lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}} \lim_{t'\to t+} \left[\frac{1}{2}i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t'}\right) + T(\mathbf{x})\right] iG'(x, x'), \tag{19.23}$$

它可用 Fourier 变换改写为

$$E = \frac{1}{2}\mu N + \frac{1}{2}V\int\frac{d^4q}{(2\pi)^4}\left(\hbar q_0 + \frac{\hbar^2\mathbf{q}^2}{2m}\right)iG'(q)e^{iq_0\eta}. \tag{19.24}$$

由此立即得到热力学势

$$\Omega(T=0) = E - \mu N = -\frac{1}{2}\mu N + \frac{1}{2}V\int\frac{d^4q}{(2\pi)^4} \times\left(\hbar q_0 + \frac{\hbar^2\mathbf{q}^2}{2m}\right)iG'(q)e^{iq_0\eta}. \tag{19.25}$$

既然方程 (18.35) [或方程 (19.22)] 决定 $N_0(\mu)$，而方程 (19.12) 决定 $N(\mu, N_0)$，我们现在能够从方程 (19.25) 求出热力学势，从而得到有关物理量. 当然，剩下的问题是算出 $G'(x, y)$，这在第 20 节中研究.

20. 微扰论和 Feynman 规则

我们现在用场论的技巧，来研究方程(19.11)所定义的玻色子 Green 函数的微扰展开式.

相互作用图象

先引入算符

$$\hat{K}_0 = E_0 - \mu N_0 + \hat{K}_0', \tag{20.1}$$

其中

$$\hat{K}_0' \equiv \hat{T} - \mu\hat{N}' = \int d^3x\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})[T-\mu]\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \tag{20.2}$$

并且引入相应的相互作用图象

$$\begin{aligned}\hat{O}_I(t) &\equiv e^{i\hat{K}_0 t/\hbar}\hat{O}_S e^{-i\hat{K}_0 t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{K}_0' t/\hbar}\hat{O}_S e^{-i\hat{K}_0' t/\hbar}.\end{aligned} \tag{20.3}$$

正如第 6 节中那样，方程 (19.2) 中的 Heisenberg 图象和相互作用图象由算符

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{i\hat{K}_0' t/\hbar} e^{-i\hat{K}'(t-t_0)/\hbar} e^{-i\hat{K}_0' t/\hbar} \tag{20.4}$$

联系起来，这个算符遵从下列运动方程

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} &= e^{i\hat{K}_0' t/\hbar}(\hat{K}' - \hat{K}_0') e^{-i\hat{K}_0' t/\hbar} \hat{U}(t, t_0) \\ &= e^{i\hat{K}_0' t/\hbar} \hat{K}_1 e^{-i\hat{K}_0' t/\hbar} \hat{U}(t, t_0) \\ &= \hat{K}_1(t) \hat{U}(t, t_0), \end{aligned} \tag{20.5}$$

其中

$$\hat{K}_1 = \sum_{j=1}^{7} \hat{V}_j, \qquad \hat{K} = \hat{K}_0 + \hat{K}_1. \tag{20.6}$$

注意

$$[\hat{K}_0, \hat{N}] = 0. \tag{20.7}$$

这样，算符 $\hat{K}_0$ 的基态 $|0\rangle$ 可认为是有确定粒子数的态. 显然，$|0\rangle$ 正是在方程 (18.9)中引入的态，这里粒子数 N 由方程 (19.12) 确定. 此外，对一切的 $\mathbf{k}$

$$a_{\mathbf{k}}|0\rangle = 0, \tag{20.8}$$

这就意味着第 9 节的微扰分析全部都保持正确，以 $|0\rangle$ 作为无相互作用的真空. 特定地说，我们立即可得结论[1]

$$\begin{aligned} iG'(x, y) = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{\infty}^{\infty} dt_m \\ \times \langle 0 | T[\hat{K}_1(t_1) \cdots \hat{K}_1(t_m) \hat{\varphi}_I(x) \hat{\varphi}_I^{\dagger}(y)] | 0 \rangle_{\text{连接}} \end{aligned} \tag{20.9}$$

既然算符 $\hat{\varphi}_I(x)\hat{\varphi}_I^{\dagger}(y)$ 也与 $\hat{N}$ 对易，与粒子数不守恒有关的困难被孤立在方程 (20.9) 的因子 $\hat{K}_1(t_i)$ 之中. 零级项成为

$$iG^0(x, y) = \langle 0 | T[\hat{\varphi}_I(x)\hat{\varphi}_I^{\dagger}(y)] | 0 \rangle, \tag{20.10}$$

---

1) 关于 $|\mathbf{O}\rangle/\langle 0|\mathbf{O}\rangle = \hat{U}(0, \pm\infty)|0\rangle/\langle 0|\hat{U}(0, \pm\infty)|0\rangle$ 是 $\hat{K}$ 的本征态的证明，可像 Gell-Mann 和 Low 定理那样得到.

它是自由 Bose 气体的 Green 函数，简单的计算给出它的 Fourier 变换

$$G^0(q) = [q_0 - \omega_q + \mu\hbar^{-1} + i\eta]^{-1}. \qquad (20.11)$$

方程 (20.8) 表明：如 $t_y > t_x$，$G^0(x, y)$ 为零；因此 $G^0(x, y)$ 在时间中只向前传播. 不同于费米子的情况 [方程 (7.45)]，方程 (20.11) 中不存在空穴的传播.

坐标空间中的 Feynman 规则

把方程 (20.9) 分解成 Feynman 图解是直截了当的，我们只要指出 $G'(x, y)$ 的 Feynman 规则的下列特点.

1. 对于每一根进入或离开顶点的虚线有一个因子 $n_0^{\frac{1}{2}}$. 进入 Feynman 图解的线 (实线和虚线) 的总数必须等于出去的线的总数.

2. 在第 m 级，m 个算符 $\hat{R}_1$ 可以用 $m!$ 种方法选取. $m!$ 这个因子对应于不同的相互作用线的可能的标记方法数，它与方程 (20.9) 中的显示的 $(m!)^{-1}$ 相消. 像在第 9 节中一样，只有在连接图中才出现这种相消.

3. 项 $\hat{V}_1$、$\hat{V}_2$ 和 $\hat{V}_7$ 在傀变数交换 $x \longleftrightarrow x'$ 下对称，其它的项 $\hat{V}_3$、$\hat{V}_4$、$\hat{V}_5$ 和 $\hat{V}_6$ 则没有这种对称性. 因此，每当 Feynman 图解中出现 $\hat{V}_1$、$\hat{V}_2$ 或 $\hat{V}_7$，总存在另一个贡献，它精确地消去这些项前面的因子 $\frac{1}{2}$. 既然 $\hat{V}_3$、$\hat{V}_4$、$\hat{V}_5$ 和 $\hat{V}_6$ 已有因子 1，因此结论是每一个不同的 Feynman 图解只需计数一次，而势则以因子 1 进入 Feynmn 图解，完全像在第 9 节中那样.

4. $G'(x, y)$ 的微扰展开式中每一个第 m 级图解具有因子 $(i/\hbar)^m(-i)^C$，这里 C 是图解中所出现的凝聚态因子 n_0 的个数.

5. 不存在时间中的反向传播，或说不存在空穴传播，这

使许我们可以从一开始就消除一大类图形. 例如,在 $\hat{V}_i$ 中没有收缩，因为它们已经按正规编序;这样，同一粒子线 G^0 或是自我闭合或是两端由同一相互作用线连接,都没有贡献,此外,注意到 Feynman 图解要对所有内变量积分，这意味着相互作用的一切可能顺序都包括在内.任一图解,除非有某种时间次序,其中所有的粒子线 G^0 在时间中向前走,不可能作出贡献. 例如,图 9.8i 和 j 恒为零，因为有相反走向的粒子线对. 注意这些限制消除了图 9.7 和 9.8 中每一个第一级和第二级图解,而这些图解对费米子传播函数是有贡献的.

动量空间中的 Feynman 规则

动量空间中的 $G'(q)$ 的规则与前面的一样，对于每根虚线有一个因子 $n_0^{\frac{1}{2}}$，第 m 级图解有总的因子 $(i/\hbar)^m(-i)^c(2\pi)^{4(C-m)}$，零级 Green 函数由方程 (20.11) 给出. 基本的顶点示于图 20.1，四维动量在每个顶点守恒. 既然凝聚态线带有等于零的四维动量，而粒子线必须具有 $\mathbf{k} \neq 0$，我们再次作出结论，没有一根相互作用线可以连接一根粒子线和三根凝聚态线.

作为例子，考虑第一级改正 $G'^{(1)}$. 项 $\hat{V}_1$、$\hat{V}_2$、$\hat{V}_5$、$\hat{V}_6$ 在第一级中对 G' 没有贡献,因为这些项不保持粒子数守恒.

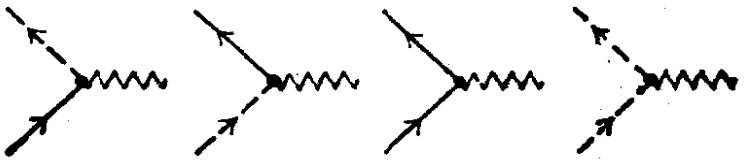


图 20.1 玻色子的基本顶点.

包含 $\hat{V}_7$ 的项也为零,因为其唯一可能的图解将包括空穴. 剩下 $\hat{V}_4$ 和 $\hat{V}_3$，它们分别导至图 20.2 a 和 b 所示图解，Feynman 规则立即给出

$$G'^{(1)}(q) = n_0\hbar^{-1}G^0(q)[V(0) + V(\mathbf{q})]G^0(q). \quad (20.12)$$

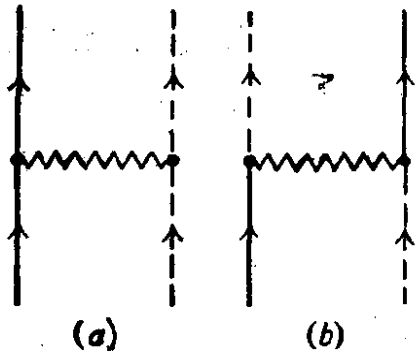


图 20.2　所有的第一级贡献 $G'^{(1)}$.

在第二级中的相应的分析要显著地长些，我们将只是把这些图解展示出来（图 20.3）. 注意图 20.3 b 和 e 代表不同的收缩，因为传播方向或说动量流在两种情况中是不同的. 图 20.3 a 到 e 是 n_0^2 数量级的，而图 20.3f 和 g 是 n_0 数量级的. 如前面所指出，不存在空穴意味着没有那种只包含非凝聚态线的第二级图解.

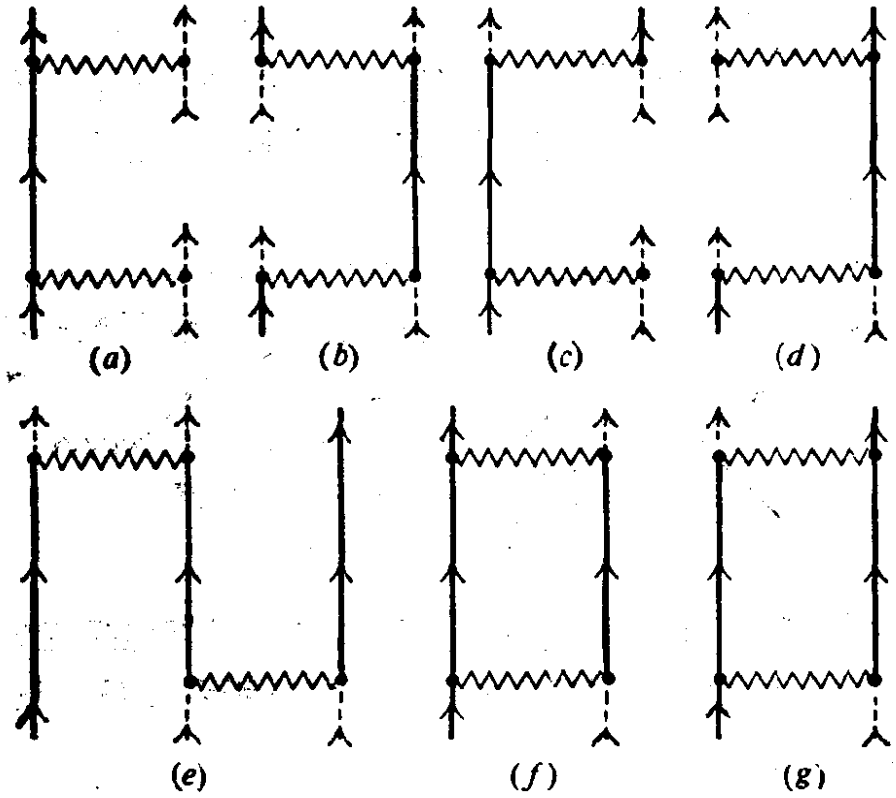


图 20.3　所有的二级贡献 $G'^{(2)}$.

Dyson 方程

粒子数的不守恒起源于 Bose 凝聚，它为凝聚态以外的粒子提供源和壑（负源）. 结果，粒子线不一定连续地穿过一个图解，这与费米子的情况相反. 尽管如此，如果正规自能定义为 Feynman 图解的一部份，它通过两条非凝聚粒子线与图解的其余部份相连接，则就仍然可能用类似于费米子的 Dyson 方程的形式来分析对 Green 函数的贡献. 但是，这里的结构比第 9 节所示的较为复杂，因为有三种不同的正规自能，如图 20.4 所示. 第一个，$\Sigma^*_{11}(p)$，有一根粒子线进去，一根粒子线出来，类似于费米子的情况. 另外两个则或有两根出来的粒子线（Σ^*_{12}）或有两根进去的粒子线（Σ^*_{21}），这反映了与 Bose 凝聚有关的新特点；对这些新的自能的最低级贡献可在图 20.3e 中显示地看到. [下标的选择在方程(20.21)中将成为明白的.]

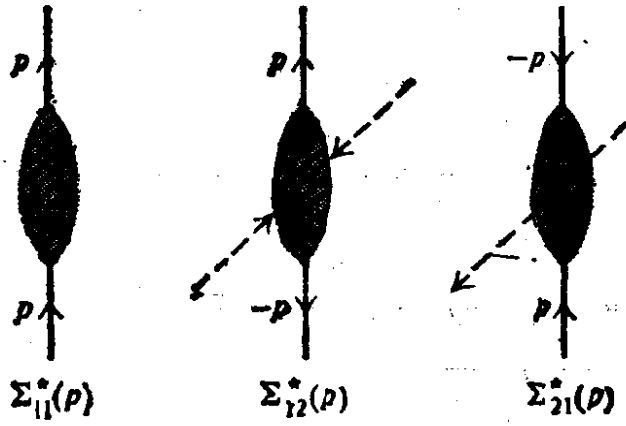


图 20.4 玻色子的正规自能.

相应地，我们必须引入两个新的准确的 Green 函数 G'_{12} 和 G'_{21} 以表示两个粒子出自凝聚态和消失于凝聚态. 它们与 G' 一起示于图 20.5，其箭头或者表示坐标空间中的传播方向，或者表示动量空间中的动量流方向. 这个系统的 Dyson 方程首

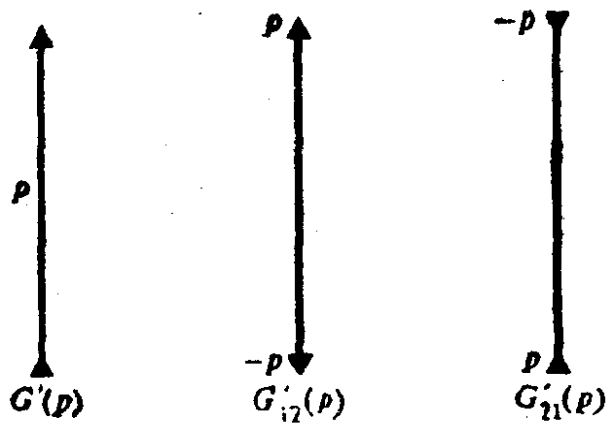


图 20.5　玻色子的非凝聚态 Green 函数.

先由 Beliaev 推出[1]. 它们示于图 20.6，在动量空间中可写成如下:

$$G'(p) = G^0(p) + G^0(p)\Sigma^{\star}_{11}(p)G'(p) + G^0(p)\Sigma^{\star}_{12}(p)G'_{21}(p) \tag{20.13 a}$$

$$G'_{12}(p) = G^0(p)\Sigma^{\star}_{12}(p)G'(-p) + G^0(p)\Sigma^{\star}_{11}(p)G'_{12}(p), \tag{20.13 b}$$

$$G'_{21}(p) = G^0(-p)\Sigma^{\star}_{21}(p)G'(p) + G^0(-p)\Sigma^{\star}_{11}(-p)G'_{21}(p). \tag{20.13 c}$$

注意总的四维动量守恒决定了图 20.6 中的动量流方向. $G'(p)$ 的一个等价方程显然是

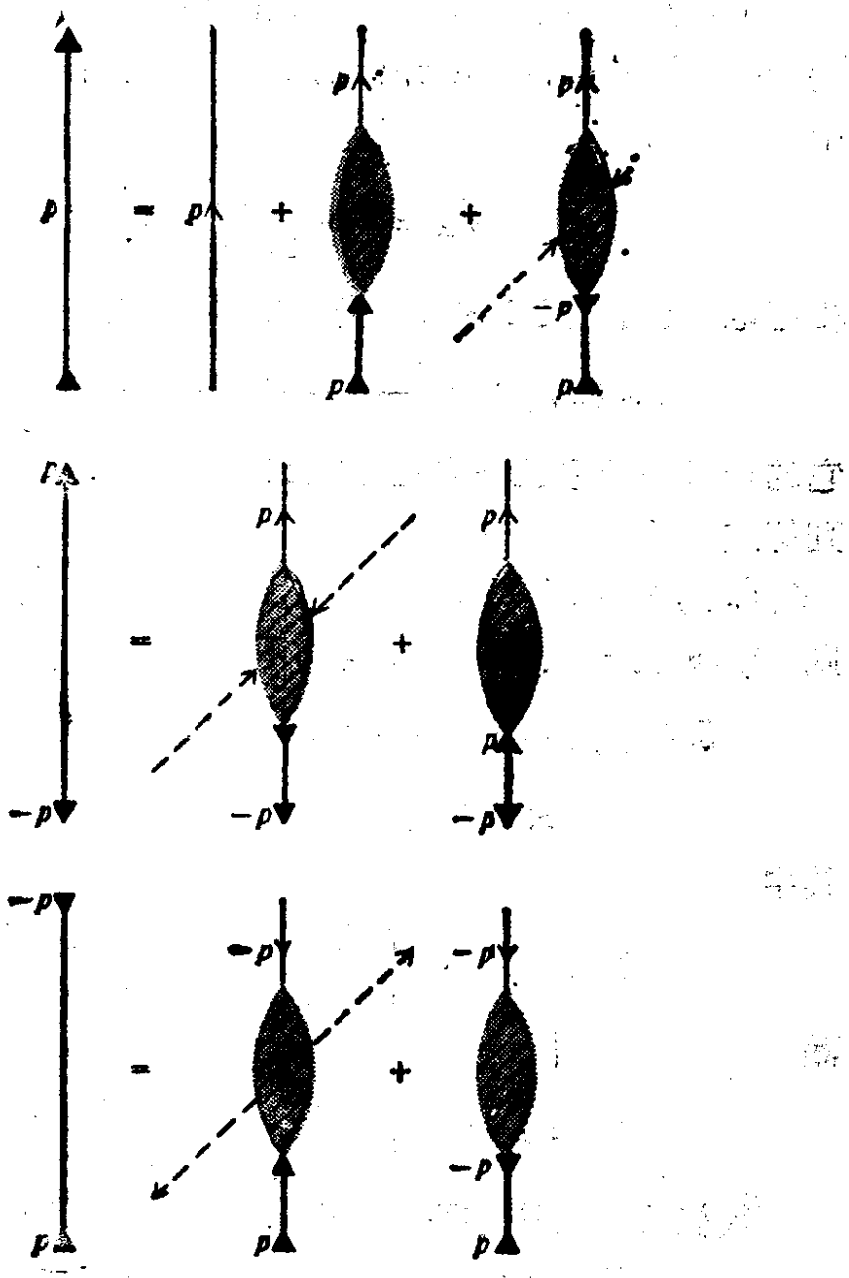
$$G'(-p) = G^0(-p) + G^0(-p)\Sigma^{\star}_{11}(-p)G'(-p) + G^0(-p)\Sigma^{\star}_{21}(p)G'_{12}(p). \tag{20.13 d}$$

把这些方程一直叠代下去，我们将得到所有的非正规自能和 Green 函数，直到微扰论的任意一级.

上面引入的反常的 Green 函数具有用 Heisenberg 场算符表示的精确定义:

$$iG'_{12}(x, y) = \frac{\langle \mathbf{O}|T[\hat{\varphi}_K(x)\hat{\varphi}_K(y)]|\mathbf{O}\rangle}{\langle \mathbf{O}|\mathbf{O}\rangle}, \tag{20.14 a}$$

1) S. T. Beliaev, *Sov. Phys.-JETP*, 7:289(1958).


p
p
p
p
p
p
p
p
p
−p
−p
−

$$G'_{12}(p)=G'_{12}(-p),\qquad G'_{21}(p)=G'_{21}(-p). \tag{20.16}$$

Dyson 方程的结构可以弄得清楚些，只要引入矩阵表示，在其中

$$\hat{\Phi}_K(x)=\begin{bmatrix}\hat{\varphi}_K(x)\\ \hat{\varphi}_K^{\dagger}(x)\end{bmatrix}. \tag{20.17}$$

相应地，我们定义 2×2 矩阵 Green 函数

$$i\mathbf{G}'(x,y)=\frac{\langle \mathbf{O}|T[\hat{\Phi}_K(x)\hat{\Phi}_K^{\dagger}(y)]|\mathbf{O}\rangle}{\langle \mathbf{O}|\mathbf{O}\rangle}, \tag{20.18}$$

它的非对角元素正是方程 (20.14) 中的那两个函数. 利用下列等式

$$G'_{11}(x,y)=G'(x,y),\qquad G'_{22}(x,y)=G'(y,x), \tag{20.19}$$

则 Dyson 方程成为单个矩阵方程

$$\mathbf{G}'(x,y)=\mathbf{G}^0(x,y)+\int d^4x_1d^4x'_1\mathbf{G}^0(x,x_1)\times\mathbf{\Sigma}^{\star}(x_1,x'_1)\mathbf{G}(x'_1,y), \tag{20.20}$$

其中

$$\mathbf{\Sigma}^{\star}(x,y)=\begin{bmatrix}\Sigma_{11}^{\star}(x,y) & \Sigma_{12}^{\star}(x,y)\\ \Sigma_{21}^{\star}(x,y) & \Sigma_{11}^{\star}(y,x)\end{bmatrix}, \tag{20.21}$$

而

$$\mathbf{G}^0(x,y)=\begin{bmatrix}G^0(x,y) & 0\\ 0 & G^0(y,x)\end{bmatrix}. \tag{20.22}$$

我们将一般地考虑均匀介质，这时方程 (20.20) 可简化为

$$\begin{cases}\mathbf{G}'(p)=\mathbf{G}^0(p)+\mathbf{G}^0(p)\mathbf{\Sigma}^{\star}(p)\mathbf{G}'(p),\\ \mathbf{G}'(p)=\begin{bmatrix}G'(p) & G'_{12}(p)\\ G'_{21}(p) & G'(-p)\end{bmatrix},\\ \mathbf{G}^0(p)=\begin{bmatrix}G^0(p) & 0\\ 0 & G^0(-p)\end{bmatrix},\\ \mathbf{\Sigma}^{\star}(p)=\begin{bmatrix}\Sigma_{11}^{\star}(p) & \Sigma_{12}^{\star}(p)\\ \Sigma_{21}^{\star}(p) & \Sigma_{11}^{\star}(-p)\end{bmatrix}.\end{cases} \tag{20.23}$$

容易验证，这个矩阵方程重现方程(20.13)．矩阵的反演给出

$$\begin{cases} G'(p) = \dfrac{p_0 + \omega_{\mathbf{p}} - \mu/\hbar + S(p) - A(p)}{D(p)}, \\ G'_{12}(p) = \dfrac{-\Sigma^{\star}_{12}(p)}{D(p)}, \quad G'_{21}(p) = \dfrac{-\Sigma^{\star}_{21}(p)}{D(p)}, \end{cases} \tag{20.24}$$

其中

$$D(p) = [p_0 - A(p)]^2 - [\omega_{\mathbf{p}} - \mu\hbar^{-1} + S(p)]^2 + \Sigma^{\star}_{12}(p)\Sigma^{\star}_{21}(p), \tag{20.25}$$

而

$$\begin{cases} S(p) = \dfrac{1}{2}[\Sigma^{\star}_{11}(p) + \Sigma^{\star}_{11}(-p)], \\ A(p) = \dfrac{1}{2}[\Sigma^{\star}_{11}(p) - \Sigma^{\star}_{11}(-p)]. \end{cases} \tag{20.26}$$

这些方程用准确的正规自能表示各种 Green 函数，因而完全是一般的．

Lehmann 表示

研究 $\boldsymbol{\Sigma}^{\star}$ 的特殊近似以前，推导 $\mathbf{G}'$ 的 Lehmann 谱表示是有意思的．证明完全像在第 7 节中那样进行，我们求得[比较方程 (7.55)]

$$\mathbf{G}'(p) = V\sum_n \left[\frac{\langle \mathbf{O}|\hat{\Phi}(0)|n\mathbf{p}\rangle\langle n\mathbf{p}|\hat{\Phi}^{\dagger}(0)|\mathbf{O}\rangle}{p_0 - \hbar^{-1}(K_{n\mathbf{p}} - K_{00}) + i\eta} - \frac{\langle \mathbf{O}|\hat{\Phi}^{\dagger}(0)|n,-\mathbf{p}\rangle\langle n,-\mathbf{p}|\hat{\Phi}(0)|\mathbf{O}\rangle}{p_0 + \hbar^{-1}(K_{n,-\mathbf{p}} - K_{00}) - i\eta}\right], \tag{20.27}$$

这里，态的完全集合 $|n\mathbf{p}\rangle$ 满足关系式

$$\hat{\mathbf{P}}|n\mathbf{p}\rangle = \hbar\mathbf{p}|n\mathbf{p}\rangle, \qquad \hat{K}|n\mathbf{p}\rangle = K_{n\mathbf{p}}|n\mathbf{p}\rangle, \tag{20.28}$$

并且每一个留数是一个 2×2 矩阵．显然，所有的 Green 函数在复 p_0 平面上具有同样的奇点，它们出现在共振频率

$\pm\hbar^{-1}(K_{n,\pm\mathbf{p}} - K_{00})$ 处. $G'(p)$ 的留数是实的，而 $G'_{12}(p)$ 和 $G'_{21}(p)$ 的则互为复共轭.

21. 弱相互作用 Bose 气体

作为这个理论的第一个应用，我们考虑弱相互作用的 Bose 气体，它的势 $V(\mathbf{x})$ 具有确定的 Fourier 变换 $V(\mathbf{p})$. 正规自能只需算到最低级，而方程 (20.12) 表明

$$\hbar\Sigma^{\star}_{11}(p) = n_0[V(0) + V(\mathbf{p})] \quad \text{(最低级)}, \quad (21.1)$$

这与 p_0 无关. 第 20 节的 Feynman 规则也适用于 G'_{12} 和 G'_{21}，我们将所有非零的第一和第二级贡献展示于图 21.1. 由观察可看出一级正规自能是

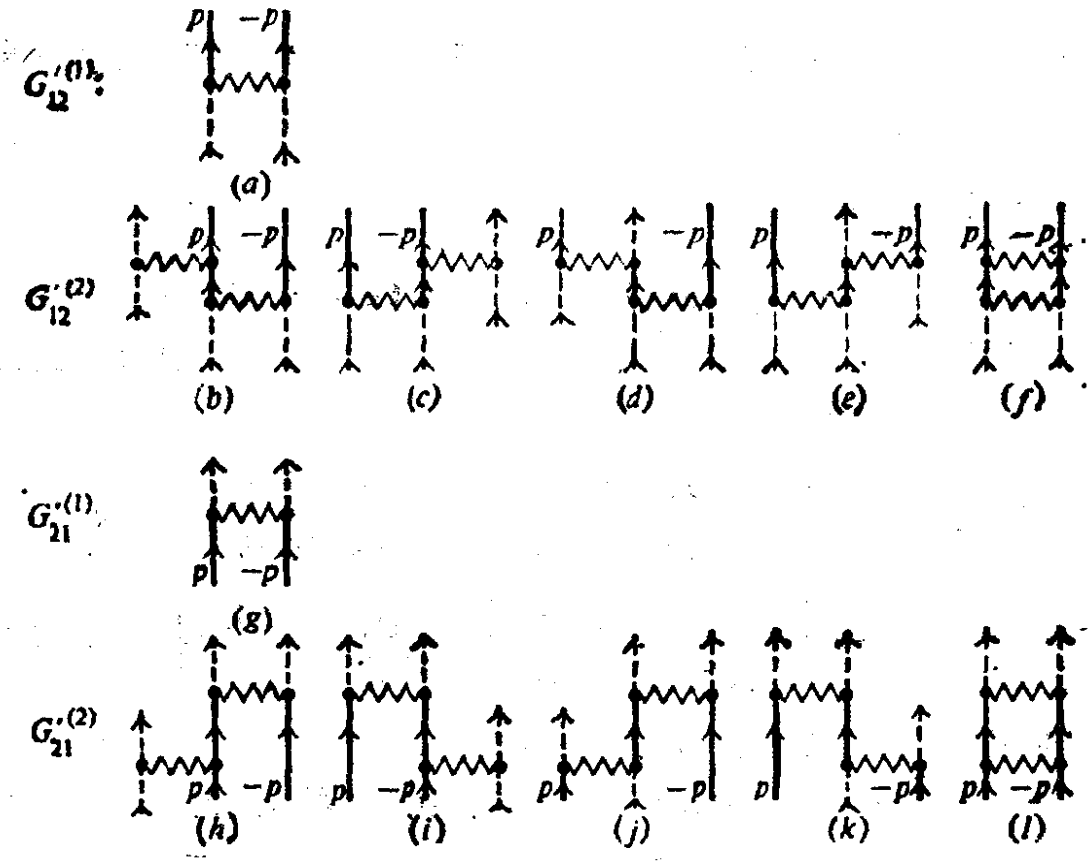


图 21.1 对 G'_{12} 和 G'_{21} 的所有第一和第二级贡献.

$$\hbar\Sigma^{*}_{12}(p) = \hbar\Sigma^{*}_{21}(p) = n_0 V(\mathbf{p}) \quad \text{(最低级)}, \tag{21.2}$$

又是与频率无关的. 通过考察图解可以在一切级中证明: 对于静止的均匀 Bose 气体, $\Sigma^{*}_{12}(p)$ 和 $\Sigma^{*}_{21}(p)$ 相等. 既然箭头代表动量流方向, 把所有箭头的方向反转就等价于取 $p \longleftrightarrow -p$. 这样 $\Sigma^{*}_{12}(p) = \Sigma^{*}_{21}(-p)$. 但是, 图解的对称性表明 Σ^{*}_{12} 和 Σ^{*}_{12} 两者必定都是 p 的偶函数, 这点也可从方程(20.16)和(20.24)得出.

在应用 Dyson 方程的解之前, 要紧的是, 先定出化学势, 这可以用方程(19.22)作到. 如果在相互作用图象中改写这个方程, 我们得到

$$\mu = \left\{\sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_m \right.$$

$$\left. \times \langle 0 | T\left[\hat{K}_1(t_1)\cdots\hat{K}_1(t_m)\frac{\partial \hat{V}}{\partial N_0}\right]|0\rangle\right\} \Big/ \left\{\sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!}\right.$$

$$\left. \times \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_m \langle 0 | T[\hat{K}_1(t_1)\cdots\hat{K}_1(t_m)]|0\rangle\right\}, \tag{21.3}$$

这里已将算符 $\partial\hat{V}/\partial N_0$ 的时间规定为 $t = 0$. 分母用于抵消不连接图解, 完全与第 9 节关于 Goldstone 定理的证明的讨论一样. 这样, 我们求得

$$\mu = \sum_{m=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_m$$

$$\times \langle 0 | T\left[\hat{K}_1(t_1)\cdots\hat{K}_1(t_m)\frac{\partial \hat{V}}{\partial N_0}\right]|0\rangle_{\text{连接}}. \tag{21.4}$$

最低一级的贡献是

$$\mu = \langle 0 | \frac{\partial \hat{V}}{\partial N_0} | 0\rangle$$

$$= 2E_0 N_0^{-1} + N_0^{-1}\langle 0 | \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4 | 0\rangle$$

$$+ (2N_0)^{-1}\langle 0 | \hat{V}_5 + \hat{V}_6 | 0\rangle$$

$$= n_0 V(0), \tag{21.5}$$

上式的各矩阵元都为零，因为它们已经是正规编序的．比较方程 (21.1)、(21.2) 和 (21.5) 表明，这些第一级量之间满足关系式

$$\mu = \hbar\Sigma_{11}^{\star}(0) - \hbar\Sigma_{12}^{\star}(0). \tag{21.6}$$

事实上这个方程在微扰论的一切级中都是正确的，它是 Hugenholtz 和 Pines 首先推得的[1]．

现在容易从方程 (20.24) 求得单粒子 Green 函数．我们注意到 $A(p)$ 恒为零，直截了当的计算给出

$$\begin{cases} G'(p) = \dfrac{p_0 + \hbar^{-1}[\epsilon_{\mathbf{p}}^0 + n_0 V(\mathbf{p})]}{p_0^2 - (E_{\mathbf{p}}/\hbar)^2}, \\ G'_{12}(p) = G'_{21}(p) = \dfrac{-\hbar^{-1} n_0 V(\mathbf{p})}{p_0^2 - (E_{\mathbf{p}}/\hbar)^2}, \end{cases} \tag{21.7}$$

其中

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{p}} &= \{[\epsilon_{\mathbf{p}}^0 + n_0 V(\mathbf{p})]^2 - [n_0 V(\mathbf{p})]^2\}^{\frac{1}{2}} \\ &= \{\epsilon_{\mathbf{p}}^0 + 2\epsilon_{\mathbf{p}}^0 n_0 V(\mathbf{p})\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{21.8}$$

把方程 (21.7) 的两个极点分开将是方便的：

$$G'(p) = \frac{u_{\mathbf{p}}^2}{p_0 - E_{\mathbf{p}}/\hbar + i\eta} - \frac{v_{\mathbf{p}}^2}{p_0 + E_{\mathbf{p}}/\hbar - i\eta}, \tag{21.9a}$$

$$\begin{aligned} G'_{12}(p) &= G'_{21}(p) \\ &= \frac{-u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}}{p_0 - E_{\mathbf{p}}/\hbar + i\eta} + \frac{u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}}{p_0 + E_{\mathbf{p}}/\hbar - i\eta}, \end{aligned} \tag{21.9b}$$

其中

$$\begin{cases} u_{\mathbf{p}} = \left\{\dfrac{1}{2} E_{\mathbf{p}}^{-1}[\epsilon_{\mathbf{p}}^0 + n_0 V(\mathbf{p})] + \dfrac{1}{2}\right\}^{\frac{1}{2}}, \\ v_{\mathbf{p}} = \left\{\dfrac{1}{2} E_{\mathbf{p}}^{-1}[\epsilon_{\mathbf{p}}^0 + n_0 V(\mathbf{p})] - \dfrac{1}{2}\right\}^{\frac{1}{2}}, \end{cases} \tag{21.10}$$

1) N. M. Hugenholtz and D. Pines, 前引文．

而无限小量 $\pm i\eta$ 是由 Lehmann 表示定出的.

这些表示式的最令人惊异的特点是,激发谱 $E_{\mathbf{p}}$ 的形式. 在长波极限下,$E_{\mathbf{p}}$ 归结为线性(类声子的)色散关系

$$E_{\mathbf{p}} \approx \hbar|\mathbf{p}|\left[\frac{n_0V(0)}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \quad (|\mathbf{p}| \to 0), \tag{21.11}$$

其特征速度[比较方程(16.11)]为

$$c = \left[\frac{n_0V(0)}{m}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{21.12}$$

这个表示式表明,只有当 $V(0) > 0$,这理论才有确定意义. 这里的计算,并不能立即说明 c 就是压缩波的速度,因为这里的 $E_{\mathbf{p}}$ 是从单粒子 Green 函数推得的,而不是从密度相关函数推得的.尽管如此,基态能量的详细计算(第 22 节)表明,c 确实是真的声速. 这个问题将在第 22 节末尾讨论.

动量很大时,$E_{\mathbf{p}}$ 的行为取决于势 $V(\mathbf{p})$,我们将假定 $V(\mathbf{x})$ 是排斥的,其力程为 r_0. 由此,对于 $|\mathbf{p}| < r_0^{-1}$,$V(\mathbf{p})$ 近似为常数,我们还要假定

$$n_0V(0) \ll \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}, \tag{21.13}$$

这限制了密度的容许范围. 于是在 $|\mathbf{p}| \approx [2mn_0V(0)/\hbar^2]^{\frac{1}{2}}$ 的邻域,色散关系 $E_{\mathbf{p}}$ 从线性的变为二次的,对于大的波矢,$E_{\mathbf{p}}$ 成为

$$E_{\mathbf{p}} \approx \epsilon_{\mathbf{p}}^0 + n_0V(\mathbf{p}) \quad (p^2 \gg 2mn_0V(0)\hbar^{-2}). \tag{21.14}$$

后一项代表附加的势能,它来源于与凝聚态中的粒子的相互作用.

从方程(19.12)算出总粒子数,是有意义的. 仅有的贡献是在 $p_0 = -E_{\mathbf{p}}/\hbar + i\eta$ 的极点,我们得到

$$n = n_0 + (2\pi)^{-3}\int d^3p v_{\mathbf{p}}^2. \tag{21.15}$$

这样,$v_{\mathbf{p}}^2$ 可解释为不在凝聚态中的粒子的基态动量分布函

数．最值得注意的特点是，$v_{\mathbf{p}}^2$ 在长波段将按 $|\mathbf{p}|^{-1}$ 而变化．此外，n_0 肯定小于 n，因为方程（21.15）的被积函数是正定的．我们看到相互作用从凝聚态中移出一些粒子，把它们激发到动量为有限值的态，从而改变了基态．从这观点看，在 $|\mathbf{p}| \to 0$ 时，$v_{\mathbf{p}}^2$ 的增长反映零动量态的大规模占据．在极限 $V(\mathbf{p}) \to 0$ 下，能谱 $E_{\mathbf{p}}$ 归结为 $\epsilon_{\mathbf{p}}^0$，而 $v_{\mathbf{p}}^2$ 成为零，恰当地重现了理想气体的行为．一个等价的说法是，方程（21.9 a）中的第二个极点，单纯来自粒子间相互作用，而当 $V(\mathbf{p}) \to 0$ 时，$\mathbf{G}'(p)$ 化为 $\mathbf{G}^0(p)$．

22. 具有相斥核心的稀薄 Bose 气体

现在考虑稀薄的 Bose 气体，其中的势是相斥的，但强度可以是任意的[1]．正如第 11 节中那样，唯一的小参数是散射长度 a 与粒子间距 $n^{-\frac{1}{3}}$ 之比，因此我们假定 $na^3 \ll 1$．势 $V(\mathbf{x})$ 不再具有完全确定的 Fourier 变换，而为了得到正规自能，取特选的一类图解加以求和就成为必不可少的了．特定地说，注意图 20.3 f 和 g 以及图 21.1 f 和 l 代表 Σ^* 的梯形图解的和的第二项（图 22.1）．这个和可以用 Bethe-Salpeter 方程算出，完全和稀薄 Fermi 气体的算法一样（第 11 节），这给出

$$\chi(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + (\varepsilon + 2m\mu\hbar^{-2} - p^2 + i\eta)^{-1}(2\pi)^{-3} \times \int d^3q v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P), \tag{22.1}$$

$$m\hbar^{-2}T(p, p', P) = (2\pi)^{-3}\int d^3q v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P). \tag{22.2}$$

1) S. T. Beliaev, *Sov. Phys-JETP*, **7**:299 (1958).

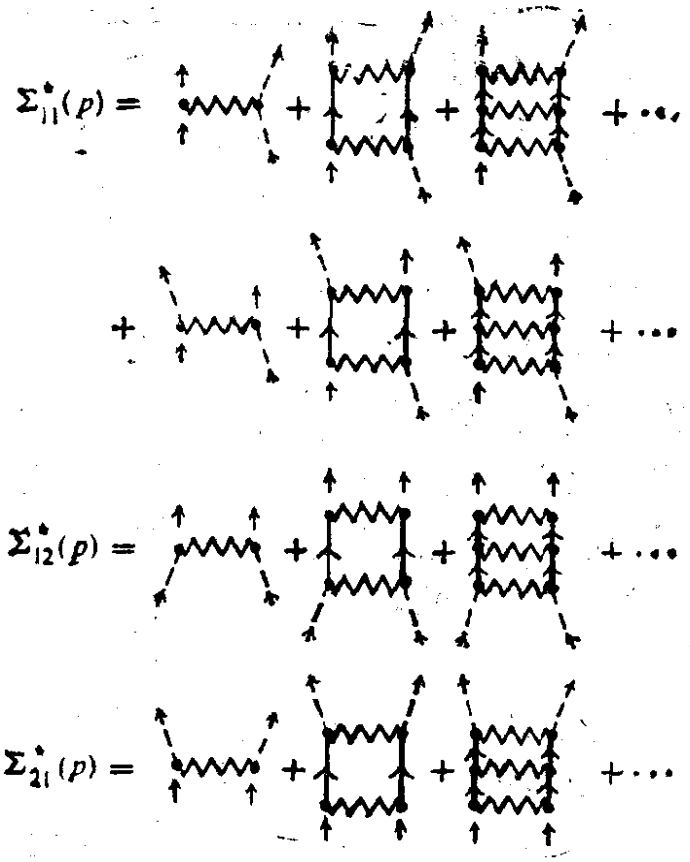


图 22.1　对正规自能的梯形图解求和.

方程(22.1)最后一项中的 μ 来自 $G^0(p)$，它依赖于化学势.这些方程比费米子的方程要简单些，因为这里的理论中没有空穴传播；由于这个理由，它们就是第 11 节中解出 χ_0 和 Γ_0 的方程，它们的解可以写为 [见方程(11.45)]

$$\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)=\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{p}')+\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{k})\times\left(\frac{1}{\varepsilon+2m\mu/\hbar^2-k^2+i\eta}+\frac{1}{k^2-p'^2-i\eta}\right)\mathcal{T}(\mathbf{p}',k)^* \tag{22.3}$$

在长波极限 ($|\mathbf{p}|\to 0$)，首项归结为[见方程 11.53]

$$\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p}',P)\to 4\pi a\hbar^2 m^{-1}(|\mathbf{p}|a\ll 1,\ |\mathbf{p}'|a\ll 1), \tag{22.4}$$

这里 a 是 s 波散射长度. 因此相应的正规自能成为 [比较方程 (11.30) 和 (11.40)]

$$\begin{cases} \hbar\Sigma_{11}^{\star}(p) = n_0\Gamma\left(\frac{1}{2}\mathbf{p}, \frac{1}{2}\mathbf{p}, P\right) + n_0\Gamma\left(-\frac{1}{2}\mathbf{p}, \frac{1}{2}\mathbf{p}, P\right) \\ \qquad\qquad \approx 8\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}, \\ \hbar\Sigma_{12}^{\star}(p) = n_0\Gamma(\mathbf{p}, 0, 0) \approx 4\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}, \\ \hbar\Sigma_{21}^{\star}(p) = n_0\Gamma(0, \mathbf{p}, 0) \approx 4\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}. \end{cases} \tag{22.5}$$

我们又一次看到 $\Sigma_{12}^{\star}(p) = \Sigma_{21}^{\star}(p)$.

将这些表示式与弱耦合 Bose 气体的表示式加以比较是有意思的. 对于短程势,上节的结果可写为

$$\begin{cases} \hbar\Sigma_{11}^{\star}(p) = 2n_0 V(0), \\ \hbar\Sigma_{12}^{\star}(p) = \hbar\Sigma_{21}^{\star}(p) = n_0 V(0) \end{cases} \qquad (|\mathbf{p}| r_0 \ll 1). \tag{22.6}$$

在 Born 近似中, Bethe-Salpeter 散射振幅化为

$$\begin{aligned} \Gamma_B(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &\approx \hbar^2 f_B(0, 0) m^{-1} = V(0) \\ &= 4\pi a_B \hbar^2 m^{-1}. \qquad (|\mathbf{p}| r_0 \ll 1), \end{aligned} \tag{22.7}$$

因此梯形图解的求和用真实的散射长度 a 取代了Born近似的 a_B[比较方程 (11.24) 和 (11.25)。].

相应的化学势从方程(21.4)定出. 在现在的近似中, 居于支配地位的项,来源于两个粒子脱离凝聚态,重复地相互作用,然后落回到凝聚态中. 这个过程示于图22.2,其中第一项正是第 21 节所研究的. 第 m 级贡献, 必定包含一个因子 $\hat{V}_2$, 激发这两个粒子, 包含 $m-1$ 个因子 $\hat{V}_7$, 使它们散射, 还包含一个因子$\hat{V}_1$,使它们回到凝聚态. 既然算符 $\partial\hat{V}/\partial N_0$ 不包含 $\hat{V}_7$, 它必定或则提供 $\hat{V}_1$, 或则提供 $\hat{V}_2$. 精确的数字因子可以定出, 只要注意到图 22.2 的贡献是下列各项的一个子集合:

$$\mu - n_0 V(0) \approx N_0^{-1} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_m$$

$$\times \langle 0 | T[\hat{R}_1(t_1)\cdots\hat{R}_1(t_m)\{\hat{V}_1(0)+\hat{V}_2(0)\}]|0\rangle_{\text{连接}}$$
$$= \frac{1}{2} i(2\pi)^{-4} \int d^4q V(\mathbf{q})[G'_{12}(q)+G'_{21}(q)], \tag{22.8}$$

这里用到了方程 (18.10), (18.11) 和 (20.14). 应用 Feynman

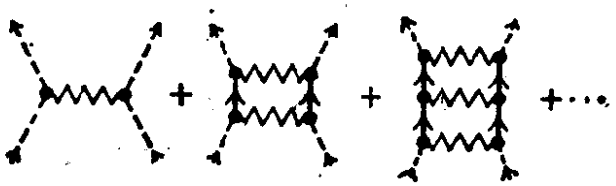


图 22.2 化学势的梯形近似.

规则计算图 22.2 中的图形的贡献，我们得到与正规自能相同的梯形近似；因而近似的化学势成为

$$\mu = n_0\Gamma(0,0,0) \approx 4\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}, \tag{22.9}$$

这再次满足 Hugenholtz-Pines 关系式 (21.6).

现在有可能在区域 $|\mathbf{p}|a \ll 1$ 中算出单粒子 Green 函数；如果我们再作代换 $V(0) = 4\pi a_B\hbar^2/m \to 4\pi a\hbar^2/m$，则计算与第 21 节中的完全等同，并给出

$$G'(p) = \frac{u_{\mathbf{p}}^2}{p_0 - E_{\mathbf{p}}/\hbar + i\eta} - \frac{v_{\mathbf{p}}^2}{p_0 + E_{\mathbf{p}}/\hbar - i\eta}, \tag{22.10}$$

其中

$$\begin{cases} u_{\mathbf{p}}^2 = \dfrac{1}{2}[E_{\mathbf{p}}^{-1}(\varepsilon_{\mathbf{p}}^0 + 4\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}) + 1], \\ v_{\mathbf{p}}^2 = \dfrac{1}{2}[E_{\mathbf{p}}^{-1}(\varepsilon_{\mathbf{p}}^0 + 4\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}) - 1], \end{cases} \tag{22.11}$$

而

$$E_{\mathbf{p}} = (\varepsilon_{\mathbf{p}}^{0^2} + 8\pi n_0 a\hbar^2 \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 m^{-1})^{\frac{1}{2}}. \tag{22.12}$$

总密度 n 容易从方程 (19.12) 得到：

$$n - n_0 = \frac{1}{2}(2\pi)^{-3}\int d^3q[E_{\mathbf{q}}^{-1}(\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 + 4\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}) - 1]$$

$$= (4\pi^2)^{-1}(8\pi n_0 a)^{\frac{3}{2}}$$
$$\times \int_0^\infty y^2 dy[(y^4 + 2y^2)^{-\frac{1}{2}}(y^2 + 1) - 1]$$
$$= \frac{8}{3}\pi^{-\frac{1}{2}}(n_0 a)^{\frac{3}{2}} \approx \frac{8}{3}\pi^{-\frac{1}{2}}(na)^{\frac{3}{2}}. \tag{22.13}$$

零动量态的相对耗尽度（depletion）由下式给出

$$\frac{n - n_0}{n} = \frac{8}{3}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{22.14}$$

它在这里的极限下是小的. 注意对于一切$\mathbf{p}$，包括区域$|\mathbf{p}|a \gg 1$在内，我们都用了方程(22.10)；容易验证，这个近似在极限$na^3 \ll 1$下只引起可忽略的误差，因为在方程(22.13)中对$y = (qa)/(8\pi n_0 a^3)^{\frac{1}{2}}$的积分是收敛的.

按类似的方式，从方程(19.24)可定出能量:

$$EV^{-1} = \frac{1}{2}\mu n + (32\pi^3)^{-1}\int d^3q(\varepsilon_q^0 - E_q)$$
$$\times [E_q^{-1}(\varepsilon_q^0 + 4\pi n_0 a\hbar^2 m^{-1}) - 1]$$
$$= \frac{1}{2}\mu n + \hbar^2(8\pi n_0 a)^{\frac{5}{2}}(16\pi^2 m)^{-1}$$
$$\times \int_0^\infty y^2 dy[(2y^3 + 3y)(y^2 + 2)^{-\frac{1}{2}} - 2y^2 - 1]$$
$$= \frac{1}{2}\mu n - \frac{64\pi^{\frac{1}{2}}(n_0 a)^{\frac{5}{2}}\hbar^2}{15m}$$
$$\approx \frac{1}{2}\mu n - \frac{64\pi^{\frac{1}{2}}(na)^{\frac{5}{2}}\hbar^2}{15m}. \tag{22.15}$$

在方程(22.13)和(22.15)中，积分代表对首项的小的改正，其数量级为$(n_0 a^3)^{\frac{1}{2}}$，因此我们置$n_0 \approx n$. E和μ的最后确定用热力学来进行最为简单[1]. 假定

$$\mu = 4\pi n a\hbar^2 m^{-1}[1 + \alpha(na^3)^{\frac{1}{2}}], \tag{22.16}$$

---

1) N. M. Hugenholtz and D. Pines, 前引文.

这里 α 是下面将要定出的数字常数. 将 μ 代入方程 (22.15) 给出

$$\frac{E}{V}=\frac{2\pi n^2a\hbar^2}{m}\left[1+\alpha(na^3)^{\frac{1}{2}}-\frac{32}{15}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]. \tag{22.17}$$

对 n 的导数定义了化学势

$$\mu=\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_V=\frac{1}{V}\frac{\partial E}{\partial n}$$

$$=\frac{4\pi na\hbar^2}{m}\left[1+\frac{5}{4}\alpha(na^3)^{\frac{1}{2}}-\frac{8}{3}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]. \tag{22.18}$$

与方程 (22.16) 比较，可表明 $\alpha=32/3\pi^{\frac{1}{2}}$. 用这方法求得

$$\frac{E}{V}=\frac{2\pi n^2a\hbar^2}{m}\left[1+\frac{128}{15}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right], \tag{22.19}$$

$$\mu=\frac{4\pi na\hbar^2}{m}\left[1+\frac{32}{3}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]. \tag{22.20}$$

方程(22.19)定出了对基态能量的主要改正，它首先由李政道和杨振宁得出[1]. 注意这改正的数量级为 $(na^3)^{\frac{1}{2}}$，从而是相互作用的非解析函数. 对基态能量的下一级改正由吴大峻算出[2]，他求得

$$\frac{E}{V}=\frac{2\pi n^2a\hbar^2}{m}\left[1+\frac{128}{15}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right.$$

$$\left.+8\left(\frac{4}{3}\pi-\sqrt{3}\right)(na^3)\ln(na^3)+O(na^3)\right], \tag{22.21}$$

但是最后一项的系数还从未定出.

从方程 (22.19) 容易求得压强 P 和压缩率 c^2 [见方程 (16.19)]

---

1) T. D. Lee and C. N. Yang *Phys. Rev.*, **105**:1119 (1957)；也见 K. A. Brueckner and K. Sawada, *Phys. Rev.*, **106**:1117 (1957).

2) T. T. Wu, *Phys. Rev.* **115**:1390 (1959). 这个值由 N. M. Hugenboltz and D. Pines 验证，前引文，他们引入了方程 (22.16) 所用的技巧，这个值也被 Sawada 所验证 *Phys. Rev* **116**: 1344 (1959).

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N = \frac{2\pi n^2 a\hbar^2}{m}\left[1 + \frac{64}{5}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right], \qquad (22.22)$$

$$c^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho_m} = \frac{1}{m}\frac{\partial P}{\partial n} = \frac{4\pi na\hbar^2}{m^2}\left[1 + 16\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]. \qquad (22.23)$$

很明白，这里必须有排斥势（$a > 0$）以保证系统稳定而不至于坍塌．在头一级，声速与方程（22.12）的 $E_{\mathbf{p}}$ 在 $\mathbf{p} \to 0$ 时的斜率一致；此外，方程（22.23）还给出对 c 的第一级改正．Beliaev 对于小的 $|\mathbf{p}|$ 把 $E_{\mathbf{p}}/\hbar|\mathbf{p}|$ 计算到 $(na^3)^{\frac{1}{2}}$ 的下一级，并且验证了与上面所得结果相符，但是他的计算很冗长．的确，已经证明，直到微扰论的一切级，单粒子激发谱随 $|\mathbf{p}| \to 0$ 而线性地趋于零，它的斜率等于宏观声速[1]．这个线性关系可以直接从方程（20.24）到方程（20.26）、方程（21.2）的第一个等式以及 Hugenholtz-Pines 关系式即方程（21.6）得到

$$D(p) \to p_0^2 - 2\omega_{\mathbf{p}}\Sigma_{12}^{\star}(0) \quad (p \to 0). \qquad (22.24)$$

这里假定 $\Sigma_{12}^{\star}(p)$ 在 $p \to 0$ 时的行为良好．

梯形近似（图 22.1）包括了对正规自能的所有第一级和第二级贡献．其结果，相应的 Dyson 方程(20.13)的解包含了单粒子 Green 函数的所有第一级和第二级图解(图 20.2、20.3 和 21.1)．当剩下的对 $\Sigma^{\star}$ 的第三级改正用 a 重新表出时，首要的贡献包含因子 $n_0^2a^3$，且不影响方程（22.14）、(22.19) 或方程 (22.20)．因此，我们看到这方法正确地处理了稀薄 Bose 气体，直到 $(na^3)^{\frac{1}{2}}$ 的数量级．

习　　题

6.1　试用 Wick 定理计算 $G'(p)$、$G'_{12}(p)$ 和 $G'_{21}(p)$ 直到相互作用势的第二级．从而验证 Feynman 规则所说的数字

1) J. Gavoret and P.Nozières, *Ann. Phys.* (*N. Y.*), **28**: 349 (1964); P. C. Hohenberg and P. C. Martin, *Ann. Phys* (*N. Y.*), **34**:291 (1965).

因子，并得出图 20.2、20.3 和 21.1 中的图解.

6.2 将 Dyson 方程 (20.13) 进行迭代，一直到 V 的第二级，并这样重新给出习题 6.1 的结果.

6.3 (a) 利用 Bogoliubov 的规定以 G'、G'_{12} 和 G'_{21} 表示出对密度相关函数 $D(\mathbf{k}, \omega)$ 的首要的贡献. 证明，所得的 $D(\mathbf{k}, \omega)$ 具有与准确的 $G'(\mathbf{k}, \omega)$ 相同的谱.

(b) 对具有相斥核心的稀薄 Bose 气体，算出 $D(\mathbf{k}, \omega)$.

6.4 证明 Hugenholtz-Pines 关系式[方程(21.6)]直到 V 的第二级.

6.5 考虑一个稠密且带电而无自旋的 Bose 气体，处于均匀且不可压缩的背景中(为了电中性).

(a) 试证明激发谱由 $E_k \approx [(\hbar\Omega_{pl})^2 + (\varepsilon_k^0)^2]^{1/2}$ 给出，其中 Ω_{pl} 是等离子体频率[方程 (15.4)]；并与第 22 节导出的结果比较.

(b) 试证，到第一级为止，耗尽度和基态能量 E 分别由

$$(n - n_0)/n = 0.211 r_s^{\frac{3}{4}} \text{ 和 } E/N = -0.803 e^2/2a_0$$

给出[1]，其中 $r_S^3 = 3/4\pi n a_0^3$，$a_0 = \hbar^2/m_B e^2$，m_B 是玻色子质量.

(c) 推导基态化学势和压强. 并解释所得的结果.

6.6 假设 Bose 凝聚发生在动量为 $\hbar\mathbf{q}$ 的态，这是描写以速度 $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{q}/m$ 作匀速运动的凝聚态. 试证凝聚态的线现在包含因子 $e^{\pm i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}$. 推导出与方程 (21.9) 和 (21.10) 类似的有关方程. 并求出在稀薄刚球型气体中的耗尽度，作为 $\mathbf{v}$ 的函数的表示式，并与方程 (22.14) 比较. 证明总动量密度是 $nm\mathbf{v}$，而不是 $n_0 m\mathbf{v}$. 解释这个结果.

---

1) L. L. Foldy, *Phys. Rev.*, **124**: 649 (1961); **125**:2208(1962).

第三部分　有限温度理论

第七章　有限温度下的场论

23. 温 度 Green 函 数

零温度多粒子系统的理论，充分利用了单粒子 Green 函数．关于G的知识既提供了系统的完全的平衡性质，又提供了系统增添一个或少一个粒子时的激发能．此外，在相互作用图象中，G容易表示为微扰展开式．然而，在有限*温度下，类似的单粒子 Green 函数在实质上比较复杂，必须把计算分成两部份．第一步，在第七章和第八章中讨论，就是引入温度 Green 函数 $\mathcal{G}$．这函数的简单微扰展开式类似于 $T=0$ 的 G 的情况，也使我们可以算出系统的平衡热力学性质．第二步（第九章）是建立 $\mathcal{G}$ 与含时间的 Green 函数的联系，以描述系统对外界扰动的线性响应；这个含时间的 Green 函数提供了系统增添一个或减少一个粒子时的激发能．

定义

在处理有限温度下的系统时，用巨正则系综最为方便，它考虑到粒子数变化的可能性．用定义

$$\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N}, \tag{23.1}$$

巨配分函数和统计算符（见第 4 节）可写为

---

* 有限（finite）应理解为既非无限大，也不为无限小．“有限温度”也有人译为“非零温度”．——责任编辑注

$$Z_G = e^{-\beta\Omega} = \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{K}}, \tag{23.2}$$

$$\hat{\rho}_G = Z_G^{-1}e^{-\beta\hat{K}} = e^{\beta(\Omega-\hat{K})}, \tag{23.3}$$

这里我们再次使用简化符号 $\beta = 1/k_BT$. 算符 $\hat{K}$ 可解释为巨正则哈密顿函数; 对任一个 Schrödinger 算符 $\hat{O}_S(\mathbf{x})$, 我们引入(修订的) Heisenberg 图象

$$\hat{O}_K(\mathbf{x}\tau) \equiv e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{O}_S e^{-\hat{K}\tau/\hbar}. \tag{23.4}$$

特别是,场算符取形式

$$\begin{cases}\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) = e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})e^{-\hat{K}\tau/\hbar}, \\ \hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) = e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x})e^{-\hat{K}\tau/\hbar}.\end{cases} \tag{23.5}$$

注意只要 τ 是实的, $\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)$ 就不是 $\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)$ 的伴随算符[1]. 但是,如果把 τ 解释为复变量,它可以解析延拓到纯虚值 $\tau = it$. 所得的表示式 $\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(\mathbf{x}, it)$ 于是成为 $\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}, it)$ 的真正的伴随算符,在形式上与方程 (6.28) 所定义的原来的 Heisenberg 图象完全一样,只不过用 $\hat{K}$ 置换了 $\hat{H}$[2]. 由于这个原因,方程 (23.5) 有时被称为虚时间算符.

单粒子温度 Green 函数定义为

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \equiv -\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G T_\tau[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau')]\}, \tag{23.6}$$

这里 $\hat{\rho}_G$ 是由方程 (23.3) 给出. 符号 T_τ 按 τ 值把算符编序, τ 值最小的算符在最右边; T_τ 也包含了符号因子 $(-1)^P$, P 是费米子算符恢复到原来顺序所需要的置换次数. 我们强调指出: 迹 (Tr) 意味着这个 Green 函数 $\mathcal{G}$ 包含了要遍及 Hilbert 空间中的态的一个完全集合的求和, 各项的贡献以算符 $\hat{\rho}_G$ 作为权重(见第 4 节).

与可观察量的关系

温度 Green 函数是有用的, 因为它使我们可以计算系统

1) 为了避免混淆,本章把算符 $\hat{O}$ 的伴随记作 $[\hat{O}]^\dagger$.

2) 这一联系首先由 F. Bloch 指出, *Z. Physik*, **74**: 295 (1932).

的热力学性能. 如果哈密顿函数与时间无关（通常正是这样），则 $\mathcal{G}$ 并不分别地依赖于 τ 和 τ'，而只依赖于组合 $\tau-\tau'$. 这个论述的证明，完全和 $T=0$ 时的证明一样[方程 (7.6)]，这里不重复.

考虑量

$$\sum_{\alpha}\mathcal{G}_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}\tau^{+})=\mathrm{tr}\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}\tau^{+}),\qquad(23.7)$$

这里 τ^{+} 表示极限值 $\tau+\eta$，而 η 是从正值趋向于零，tr 表示矩阵指标的迹. 按定义

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\,\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}\tau^{+})&=\mp\sum_{\alpha}\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{G}\hat{\psi}^{\dagger}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)]\\&=\mp e^{\beta\Omega}\sum_{\alpha}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}}e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x})\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x})e^{-\hat{K}\tau/\hbar}]\\&=\mp e^{\beta\Omega}\sum_{\alpha}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}}\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x})\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x})]\\&=\mp\langle n(\mathbf{x})\rangle,\qquad(23.8)\end{aligned}$$

这里利用了迹的轮换性质

$$\mathrm{Tr}(ABC)=\mathrm{Tr}(BCA)=\mathrm{Tr}(CAB),$$

以及同一算符的两个函数的可对易性. 像前面那样，我们约定上面（下面）的符号属于玻色子（费米子）. 系统中的平均粒子数由下式给出

$$N(T,V,\mu)=\mp\int d^{3}x\,\mathrm{tr}\,\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}\tau^{+}),\qquad(23.9)$$

并且是指明的变量的显函数. 类似地，任何单体算符的系综平均可用 $\mathcal{G}$ 表出. 用方程 (7.7) 的记号，我们有

$$\begin{aligned}\langle\hat{J}\rangle&=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G}\hat{J})\\&=\sum_{\alpha\beta}\int d^{3}x\lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}J_{\beta\alpha}(\mathbf{x})\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{G}\hat{\psi}^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x}')\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x})]\\&=\mp\sum_{\alpha\beta}\int d^{3}x\lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}\lim_{\tau'\to\tau^{+}}J_{\beta\alpha}(\mathbf{x})\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')\end{aligned}$$

$$= \mp \int d^3x \lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}} \lim_{\tau'\to\tau^+} \mathrm{tr}[J(\mathbf{x})\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')]. \quad (23.10)$$

有意义的特例是

$$\langle\hat{\sigma}\rangle = \mp \int d^3x \mathrm{tr}[\sigma\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}\tau^+)], \quad (23.11\,a)$$

$$\langle\hat{T}\rangle = \mp \int d^3x \lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}} \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} \mathrm{tr}\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau^+). \quad (23.11\,b)$$

两体算符也是重要的，但是这种算符的系综平均通常需要两粒子温度 Green 函数. 然而，在哈密顿函数由动能和两体势能的和所组成[方程 (7.12)] 的特例中，平均势能可只用 $\mathscr{G}$ 表示，完全像在方程 (7.22) 中那样. 计算是从 Heisenberg 运动方程

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) = \hbar\frac{\partial}{\partial\tau}[e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})e^{-\hat{K}\tau/\hbar}]$$
$$= [\hat{K}, \hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)] \quad (23.12)$$

开始. 为简单起见，假定势与自旋无关 [比较方程 (10.2)]，在有限温度理论的应用中，情况通常就是这样的. 算出方程 (23.12) 中的对易式是直截了当的，这给出[比较方程 (7.19)]

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) = \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) + \mu\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)$$
$$- \int d^3x''\hat{\phi}^\dagger_{K\gamma}(\mathbf{x}''\tau)\hat{\phi}_{K\gamma}(\mathbf{x}''\tau)$$
$$\times V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau). \quad (23.13)$$

这样，单粒子 Green 函数满足关系式

$$\lim_{\tau'\to\tau^+}\left[\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')\right]$$
$$= \mp \mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_G\hat{\phi}^\dagger_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau)\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\right]$$
$$= \mp \mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}_G\hat{\phi}^\dagger_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau)\left[\left(\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+\mu\right)\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\right.\right.$$

$$-\int d^3x''\hat{\psi}^{\dagger}_{K\alpha}(\mathbf{x}''\tau)\hat{\psi}_{K\gamma}(\mathbf{x}''\tau)V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\Big]\Big\}.$$

最后一项实际上是有意义的量，我们求得

$$\begin{aligned}\langle\hat{V}\rangle &\equiv \frac{1}{2}\int d^3x d^3x'' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')\\ &\quad\times \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_G\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x})\hat{\psi}^{\dagger}_{\gamma}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_{\gamma}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x})]\\ &= \mp\frac{1}{2}\int d^3x \lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}\lim_{\tau'\to\tau^+}\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+\mu\right]\\ &\quad\times \mathrm{tr}\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau'),\end{aligned}\tag{23.14}$$

这里用了迹的轮换性质，使它从 Heisenberg 图象变换到 Schrodinger 图象．方程 (23.11 b) 和 (23.14) 可以结合起来以提供哈密顿函数的系综平均，它正是内能 E（见第 4 节）．

$$\begin{aligned}E &= \langle\hat{H}\rangle = \langle\hat{T}+\hat{V}\rangle\\ &= \mp\frac{1}{2}\int d^3x \lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}\lim_{\tau'\to\tau^+}\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+\mu\right]\\ &\quad\times \mathrm{tr}\,\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau').\end{aligned}\tag{23.15}$$

平均的相互作用能也可用以求得热力学势 Ω，这用到对一个可变的耦合常数进行积分．如果哈密顿函数写成

$$\hat{H}(\lambda)=\hat{H}_0+\lambda\hat{H}_1,\quad \hat{K}(\lambda)=\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1,\tag{23.16}$$

其中 $\hat{K}_0=\hat{H}_0-\mu\hat{N}$，而 $\hat{K}_1=\hat{H}_1$，则 $\lambda=1$ 描写实际的物理系统，而 $\lambda=0$ 描写某个较简单的系统．对于大多数的应用，$\hat{H}_0$ 是无相互作用粒子的哈密顿函数，但这决不是必须的．对 $K(\lambda)$ 定义巨配分函数：

$$Z_{G\lambda}=e^{-\beta\Omega\lambda}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{K}(\lambda)}.\tag{23.17}$$

于是对 λ 的导数由下式给出

$$\frac{\partial\Omega_\lambda}{\partial\lambda}=-k_BTZ^{-1}_{G\lambda}\frac{\partial Z_{G\lambda}}{\partial\lambda}.\tag{23.18}$$

紧接着的问题是怎样计算这个导数．把方程 (23.17) 中的指数函数算符展开，

$$Z_{G\lambda}=\sum_{n=0}^{\infty}(n!)^{-1}(-\beta)^n\mathrm{Tr}(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)^n,$$

因而

$$\frac{\partial Z_{G\lambda}}{\partial\lambda}=\sum_{n=1}^{\infty}(n!)^{-1}(-\beta)^n\frac{\partial}{\partial\lambda}\mathrm{Tr}(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)^n.$$

在这级数的第 n 项中，求导数必须轮流作用于 n 个因子 $(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)$ 中的每一个，这给出 n 个项，在这些项中，单个的因子 $\hat{K}_1$ 出现于所有可能的位置上. 迹的轮换性质使得这 n 个项的每一个都可重新编序，从而证明是等同的. 按这一方式，导数成为

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z_{G\lambda}}{\partial\lambda}&=\sum_{n=1}^{\infty}(n!)^{-1}(-\beta)^n n\mathrm{Tr}[(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)^{n-1}\hat{K}_1]\\&=-\beta\sum_{n=1}^{\infty}[(n-1)!]^{-1}(-\beta)^{n-1}\\&\quad\times\mathrm{Tr}[(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)^{n-1}\hat{K}_1]\\&=-\beta\,\mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{K}(\lambda)}\hat{K}_1)\\&=-\frac{\beta}{\lambda}e^{-\beta\Omega_\lambda}\langle\lambda\hat{K}_1\rangle_\lambda,\end{aligned}\tag{23.19}$$

这里 $\langle\cdots\rangle_\lambda$ 表示用算符 $\hat{K}(\lambda)$ 得出的系综平均值. 方程 (23.18) 和 (23.19) 的结合给出

$$\frac{\partial\Omega_\lambda}{\partial\lambda}=\lambda^{-1}\langle\lambda\hat{K}_1\rangle_\lambda=\lambda^{-1}\langle\lambda\hat{H}_1\rangle_\lambda.\tag{23.20}$$

从 $\lambda=0$ 到 $\lambda=1$ 进行积分，

$$\Omega-\Omega_0=\int_0^1\lambda^{-1}d\lambda\langle\lambda\hat{H}_1\rangle_\lambda.\tag{23.21}$$

量 Ω_0 是对应于哈密顿函数 $\hat{H}_0$ 的热力学势，一般大都是容易计算的，因此方程 (23.21) 提供了用系统的相互作用能来表示相互作用系统的 Ω 的表示式，系统具有可变耦合常数.

这个公式可用方程 (23.14) 改写，用哈密顿函数为 $\hat{H}(\lambda)$ 的系统的单粒子 Green 函数 $\mathscr{G}^{\lambda}$ 表出，

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) \mp \int_0^1 \lambda^{-1} d\lambda \int d^3x \times \lim_{\mathbf{x}' \to \mathbf{x}} \lim_{\tau' \to \tau^+} \frac{1}{2}\left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu\right] \times \operatorname{tr} \mathscr{G}^{\lambda}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau'), \tag{23.22}$$

这在研究电子气体的热力学时是有用的（第 30 节）. 值得注意的是：方程 (23.15) 和 (23.22) 代表有限温度下的不同物理量，这与零温度下的情况不同[方程 (7.23) 和 (7.31)]. 此外，有限温度下的热力学势，需要对耦合常数的积分，如在 (23.22) 中看到的那样.

例：无相互作用系统

作为一个简单的例子，算出无相互作用系统的温度 Green 函数 $\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')$ 是有意义的. 在没有外场时，单粒子态就是平面波，于是[比较方程 (7.33)]，

$$\begin{cases} \hat{\psi}(\mathbf{x}) = V^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \eta_\lambda a_{\mathbf{k}\lambda}, \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = V^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \eta_\lambda^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger, \end{cases} \tag{23.23}$$

对于自旋为零的玻色子，这里的自旋指标和自旋波函数是不存在的. 既然我们现在考虑的是系综平均值，而不是基态期待值，对于费米子，变换到粒子和空穴的正则变换并不提供什么好处，方程 (7.40) 中的关系不再具有特殊的地位. 这样，无相互作用系统的 Heisenberg 场算符是

$$\begin{cases} \hat{\psi}_K(\mathbf{x}\tau) = V^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \eta_\lambda e^{\hat{K}_0\tau/\hbar} a_{\mathbf{k}\lambda} e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar}, \\ \hat{\psi}_K^\dagger(\mathbf{x}\tau) = V^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \eta_\lambda^\dagger e^{\hat{K}_0\tau/\hbar} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar}. \end{cases} \tag{23.24}$$

虽然右边的算符可用直接计算加以简化，但较容易的是利用运动方程

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}a_{\mathbf{k}\lambda}(\tau)=e^{\hat{K}_0\tau/\hbar}[\hat{K}_0,a_{\mathbf{k}\lambda}]e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar}$$

$$=-(\varepsilon_k^0-\mu)a_{\mathbf{k}\lambda}(\tau), \tag{23.25}$$

其中 $\varepsilon_k^0=\hbar^2k^2/2m$. 这微分方程容易积分:

$$a_{\mathbf{k}\lambda}(\tau)=a_{\mathbf{k}\lambda}\exp\frac{-(\varepsilon_{\mathbf{k}}^0-\mu)\tau}{\hbar}, \tag{23.26 a}$$

类似地

$$a_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}(\tau)=a_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}\exp\frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}}^0-\mu)\tau}{\hbar}. \tag{23.26 b}$$

再次注意方程(23.26 b)不是方程(23.26 a)的伴随方程.

无相互作用的温度 Green 函数定义为

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=-e^{\beta\Omega_0}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{K}_0}T_\tau[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}_{K\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}'\tau')]\}, \tag{23.27}$$

为了确定起见，先研究 $\tau>\tau'$ 的情况:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=-V^{-1}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\sum_{\lambda\lambda'}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}')}(\eta_\lambda)_\alpha(\eta_{\lambda'}^{\dagger})_\beta$$

$$\times\exp\left[\frac{-(\varepsilon_k^0-\mu)\tau}{\hbar}+\frac{(\varepsilon_{k'}^0-\mu)\tau'}{\hbar}\right]$$

$$\times\langle a_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}'\lambda'}^{\dagger}\rangle_0$$

$$=-V^{-1}\delta_{\alpha\beta}\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}$$

$$\times\exp\left[\frac{-(\varepsilon_k^0-\mu)(\tau-\tau')}{\hbar}\right]\langle a_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}\rangle_0,$$

这是从无相互作用系统的平移不变性和旋转不变性得到的. 此外，系综平均值可改写为

$$\langle a_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}\rangle_0=1\pm\langle a_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}a_{\mathbf{k}\lambda}\rangle_0=1\pm n_{\mathbf{k}}^0, \tag{23.28}$$

这里上面(下面)的符号属于玻色子(费米子)，而 $n_{\mathbf{k}}^0$ 从统计力

学[方程 (5.9) 和 (5.12)] 知道是

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \{\exp[\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu) \mp 1]\}^{-1}. \tag{23.29}$$

这些方程结合在一起给出

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = -\delta_{\alpha\beta} V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \times \exp\left[\frac{-(\varepsilon_k^0 - \mu)(\tau - \tau')}{\hbar}\right](1 \pm n_{\mathbf{k}}^0) \quad (\tau > \tau'). \tag{23.30 a}$$

对 $\tau < \tau'$ 进行完全一样的计算给出

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = \mp\delta_{\alpha\beta} V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \times \exp\left[\frac{-(\varepsilon_k^0 - \mu)(\tau - \tau')}{\hbar}\right] n_{\mathbf{k}}^0 \quad (\tau < \tau'). \tag{23.30 b}$$

如所预期，$\mathscr{G}^0$ 对矩阵指标是对角的，而且只依赖于差 $(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau')$. 有意思的是用方程 (23.9) 和 (23.15) 计算平均的粒子数 N_0 和平均能量 E_0; 直截了当的计算可重现第 5 节的结果

$$N_0(T, V, \mu) = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^0 = \sum_{\mathbf{k}} \{\exp[\beta(\varepsilon_k^0 - \mu)] \mp 1\}^{-1}, \tag{23.31 a}$$

$$E_0(T, V, \mu) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_k^0 n_{\mathbf{k}}^0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_k^0 \{\exp[\beta(\varepsilon_k^0 - \mu)] \mp 1\}^{-1}. \tag{23.31 b}$$

24. 有限温度下的微扰论与 Wick 定理

温度 Green 函数可从微观哈密顿函数算出来，只是在这

种范围内它才是有用的．像零温度理论中一样，引入相互作用图象是方便的，这图象就作为微扰计算的有用的基础．

相互作用图象

对于 Schrödinger 图象中一个任意的算符 $\hat{O}_S$，我们用

$$\hat{O}_I(\tau) \equiv e^{\hat{K}_0\tau/\hbar}\hat{O}_S e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar},$$

$$\hat{O}_K(\tau) \equiv e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{O}_S e^{-\hat{K}\tau/\hbar} \tag{24.1}$$

形式地定义相互作用图象中的 $\hat{O}_I(\tau)$ 和 Heisenberg 图象中的 $\hat{O}_K(\tau)$．这两个图象简单地由下面的方程联系起来［比较方程 (6.31)］：

$$\begin{aligned}\hat{O}_K(\tau) &= e^{\hat{K}\tau/\hbar}e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar}\hat{O}_I(\tau)e^{\hat{K}_0\tau/\hbar}e^{-\hat{K}\tau/\hbar}\\ &= \hat{\mathscr{U}}(0,\tau)\hat{O}_I(\tau)\hat{\mathscr{U}}(\tau,0),\end{aligned} \tag{24.2}$$

其中算符 $\hat{\mathscr{U}}$ 定义为

$$\hat{\mathscr{U}}(\tau_1,\tau_2) \equiv e^{\hat{K}_0\tau_1/\hbar}e^{-\hat{K}(\tau_1-\tau_2)}e^{-\hat{K}_0\tau_2/\hbar}. \tag{24.3}$$

注意 $\hat{\mathscr{U}}$ 不是幺正算符，但仍满足群的性质

$$\hat{\mathscr{U}}(\tau_1,\tau_2)\hat{\mathscr{U}}(\tau_2,\tau_3) = \hat{\mathscr{U}}(\tau_1,\tau_3) \tag{24.4}$$

以及边界条件

$$\hat{\mathscr{U}}(\tau_1,\tau_1) = 1. \tag{24.5}$$

此外，$\hat{\mathscr{U}}$ 对“时间”的导数，容易计算出来：

$$\begin{aligned}\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\mathscr{U}}(\tau,\tau') &= e^{\hat{K}_0\tau/\hbar}(\hat{K}_0-\hat{K})e^{-\hat{K}(\tau-\tau')/\hbar}e^{-\hat{K}_0\tau'/\hbar}\\ &= e^{\hat{K}_0\tau/\hbar}(\hat{K}_0-\hat{K})e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar}\hat{\mathscr{U}}(\tau,\tau')\\ &= -\hat{K}_1(\tau)\hat{\mathscr{U}}(\tau,\tau').\end{aligned} \tag{24.6}$$

这里

$$\hat{K}_1(\tau) = e^{\hat{K}_0\tau/\hbar}\hat{K}_1 e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar}. \tag{24.7}$$

由此可见算符 $\hat{\mathscr{U}}(\tau,\tau')$ 与方程 (6.11) 所引人的幺正算符实质上遵守同一微分方程，我们可立即写出解

$$\hat{\mathscr{U}}(\tau,\tau')=\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_{\tau'}^{\tau}d\tau_1\cdots$$

$$\times\int_{\tau'}^{\tau}d\tau_n T_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\cdots\hat{K}_1(\tau_n)]. \qquad (24.8)$$

最后，方程(24.3)可改写为

$$e^{-\hat{K}\tau/\hbar}=e^{-\hat{K}_0\tau/\hbar}\hat{\mathscr{U}}(\tau,0). \qquad (24.9)$$

如果置 τ 等于 $\beta\hbar$，则方程(24.9)提供巨配分函数的微扰展开式

$$e^{-\beta\Omega}=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{K}}$$

$$=\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}_0}\hat{\mathscr{U}}(\beta\hbar,0)]$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_0^{\beta\hbar}d\tau_1\cdots$$

$$\times\int_0^{\beta\hbar}d\tau_n\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{K}_0}T_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\cdots\hat{K}_1(\tau_n)]\}, \qquad (24.10)$$

这里所有的积分都是在一个有限区域上的积分．实际上，对图解分析来说，这个方程不及方程(23.22)有用，这是由于计数不连接图解很困难．

现在可以在相互作用图象中改写准确的温度 Green 函数．如果 $\tau>\tau'$，我们有

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$

$$=-e^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}}\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau')]$$

$$=-e^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{K}_0}\hat{\mathscr{U}}(\beta\hbar,0)[\hat{\mathscr{U}}(0,\tau)\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\mathscr{U}}(\tau,0)]$$

$$\times[\hat{\mathscr{U}}(0,\tau')\hat{\psi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')\hat{\mathscr{U}}(\tau',0)]\}$$

$$=-\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}_0}\hat{\mathscr{U}}(\beta\hbar,\tau)\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\mathscr{U}}(\tau,\tau')$$

$$\times\hat{\psi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')\hat{\mathscr{U}}(\tau',0)]\times\{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}_0}\hat{\mathscr{U}}(\beta\hbar,0)]\}^{-1} \qquad (24.11)$$

这里用到 $\tau=\beta\hbar$ 的方程(24.9)．对于 $\tau<\tau'$ 的类似的计算给出

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=\mp\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}_0}\hat{\mathscr{U}}(\beta\hbar,\tau')\hat{\psi}^{\dagger}_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')$$
$$\times\hat{\mathscr{U}}(\tau',\tau)\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\mathscr{U}}(\tau,0)]\{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}_0}\hat{\mathscr{U}}(\beta\hbar,0)]\}^{-1} \tag{24.12}$$

方程(24.11)和(24.12)精确地具有方程(8.8)所分析过的结构，它们显然可合并成下面的形式

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=$$
$$-\mathrm{Tr}\Big\{e^{-\beta\hat{K}_0}\sum_{n=0}^{\infty}(-\hbar)^n(n!)^{-1}\int_0^{\beta\hbar}d\tau_1\cdots$$
$$\int_0^{\beta\hbar}d\tau_n T_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\cdots\hat{K}_1(\tau_n)\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}^{\dagger}_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')]\Big\}$$
$$\times\Big\{\mathrm{Tr}\Big(e^{-\beta\hat{K}_0}\sum_{n=0}^{\infty}(-\hbar)^n(n!)^{-1}\int_0^{\beta\hbar}d\tau_1\cdots$$
$$\int_0^{\beta\hbar}d\tau_n T_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\cdots\hat{K}_1(\tau_n)].\Big)\Big\}^{-1} \tag{24.13}$$

在方程(24.10)中可以看到，分母正是 $e^{-\beta\Omega}$ 的微扰展开式；不过，按现在的形式，它是用以消去所有的不连接图解的，就完全象在零温度理论中一样[比较方程(9.3)到(9.5)].

$\mathscr{G}$ 的周期性

方程(24.13)表明对变量 τ_i 的积分全都是从0伸展到 $\beta\hbar$. 我们将看到，将 τ 和 τ' 限制在这个区间上也足够了，因而差值 $\tau-\tau'$ 满足条件 $-\beta\hbar<\tau-\tau'<\beta\hbar$. 在这个有限制的区域内，温度 Green 函数显示令人注意的周期性，它对于后面的所有工作是十分重要的. 为确定起见，设 τ' 固定 $(0<\tau'<\beta\hbar)$. 简单的计算表明

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}0,\mathbf{x}'\tau')=\mp e^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{K}}\hat{\psi}^{\dagger}_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau')\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}0)\}$$
$$=\mp e^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}\{\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}0)e^{-\beta\hat{K}}\hat{\psi}^{\dagger}_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau')\}$$

$$= \mp e^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta K}\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\beta\hbar)\hat{\psi}^{\dagger}_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau')\}$$
$$= \pm\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\beta\hbar,\mathbf{x}'\tau'), \qquad (24.14\,a)$$

这式的第二行用到迹的轮换性质. 类似的分析给出

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'0) = \pm\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\beta\hbar), \qquad (24.14\,b)$$

因此玻色子(费米子)的单粒子温度 Green 函数在范围 $0 \leqslant \tau, \tau' \leqslant \beta\hbar$ 内是每个时间变量的周期函数(反周期函数),其周期为 $\beta\hbar$. 这个关系式对下面的分析是非常重要的,它体现了巨正则系综中统计算符 $\hat{\rho}_G$ 的精确形式.

在通常情况下,$\hat{H}$ 与时间无关,$\mathscr{G}$ 只依赖于组合 $\tau-\tau'$. 于是方程 (24.14) 可改写为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\tau-\tau'<0)$$
$$= \pm\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\tau-\tau'+\beta\hbar). \qquad (24.15)$$

在所规定的范围 $0 \leqslant \tau, \tau' \leqslant \beta\hbar$ 内,从条件 $\tau-\tau'<0$ 必然推论出 $\tau-\tau'+\beta\hbar > 0$. 看看无相互作用的 Green 函数 $\mathscr{G}^0$ 怎样满足方程 (24.15) 是有意思的. 方程 (23.30a) 和 (23.30b) 的比较给出关系式

$$n^0_{\mathbf{k}} e^{\beta(\epsilon^0_{\mathbf{k}}-\mu)} = 1 \pm n^0_{\mathbf{k}}, \qquad (24.16)$$

这也可直接用方程 (23.29) 验证.

Wick 定理的证明

温度 Green 函数 $\mathscr{G}$ 的微扰展开式 [方程 (24.13)] 显然十分类似于零温度 Green 函数 G [方程 (8.9)]. 在零温度的情况,展开式可用 Wick 定理大大简化,这定理提供了把相互作用表象中的算符的 T 乘积与正规乘积联系起来的规则. 正规乘积的基态期待值恒为零,因而 G 就只包含完全收缩的项. 可惜在有限温度不存在这样的简化,因为只有在零温度,正规乘积的系综平均才是零. 尽管这样,如 Matsubara 所首先证

明[1]，存在一个推广的 Wick 定理，它使 $\mathcal{G}$ 的图解展开成为可能．这个推广的 Wick 定理只处理算符的系综平均，并且依赖于统计算符 $e^{-\beta\hat{K}_0}$ 的详细形式．因此，它不同于原来的 Wick 定理，不再是对任意矩阵元都成立的算符恒等式．

在考虑一般定理以前，考察方程(24.13)开头的少数几项是有帮助的．分子可改写为

$$-\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{K}_0}T_\tau[\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')]\}$$
$$+\hbar^{-1}\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\hat{K}_0}\int_0^{\beta\hbar}d\tau_1 T_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')]\right\}+\cdots. \tag{24.17}$$

这里第一项是 $e^{-\beta\Omega_0}\mathcal{G}^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$，而如果 $\hat{K}_1=0$，则它是准确的．在通常情况下，$\hat{K}_1$ 包含相互作用图象中四个场算符的空间积分，而方程(24.17)的第二项牵涉到用统计算符 $e^{-\beta\hat{K}_0}$ 算出的六个场算符的系综平均．这种一般的结构存在于一切级，而推广的 Wick 定理恰恰是设计来处理这类问题的．

虽然未微扰系统常常是均匀的，但是许多有意义的例子却是非均匀的，因此对于相互作用图象的算符，我们将采用一般的单粒子基 $\{\varphi^0_j(\mathbf{x})\}$．如第 2 节那样，场算符可写成

$$\begin{cases}\hat{\psi}(\mathbf{x})=\sum_j\varphi^0_j(\mathbf{x})a_j,\\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})=\sum_j\varphi^0_j(\mathbf{x})^\dagger a^\dagger_j,\end{cases} \tag{24.18}$$

其中本征函数满足本征值方程

$$\hat{K}_0\varphi^0_j(\mathbf{x})=(\varepsilon^0_j-\mu)\varphi^0_j(\mathbf{x}), \tag{24.19}$$

而指标 j 包括自旋量子数和空间量子数．采用方便的缩写

$$\varepsilon_j\equiv\varepsilon^0_j-\mu, \tag{24.20}$$

方程(24.18)的相互作用图象成为

---

1) T. Matsubara, *Prog. Theoret. Phys. (Kyoto)*, **14**: 351 (1955)；这里的证明是按照 M. Gaudin, *Nucl. Phys.*, **15**: 89 (1960) 的．

$$\begin{cases} \hat{\phi}_I(\mathbf{x}\tau) = \sum_j \varphi_j^0(\mathbf{x}) a_j e^{-\varepsilon_j \tau/\hbar}, \\ \hat{\phi}_I^\dagger(\mathbf{x}\tau) = \sum_j \varphi_j^0(\mathbf{x})^\dagger a_j^\dagger e^{\varepsilon_j \tau/\hbar}. \end{cases} \tag{24.21}$$

对应的单粒子 Green 函数容易算出为

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = -\sum_j \varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^\dagger e^{-\varepsilon_j(\tau-\tau')/\hbar} \times \begin{cases} 1 \pm n_j^0 & (\tau > \tau') \\ \pm n_j^0 & (\tau < \tau'), \end{cases} \tag{24.22}$$

其中

$$n_j^0 = e^{\beta\Omega_0}\mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{K}_0} a_j^\dagger a_j) = (e^{\beta\varepsilon_j} \mp 1)^{-1}. \tag{24.23}$$

微扰展开式[方程 (24.17)] 中的一般项典型地含有因子

$$\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0} T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}]\} = \langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}]\rangle_0, \tag{24.24}$$

这里 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \cdots, \hat{F}$ 是相互作用图象中的场算符，各有其自己的 τ 变量，而

$$\hat{\rho}_{G0} = e^{\beta(\Omega_0 - \hat{K}_0)}. \tag{24.25}$$

定义收缩如下，

$$\begin{aligned} \hat{A}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot} &= \langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}]\rangle_0 \\ &= \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0} T_\tau[\hat{A}\hat{B}]\}. \end{aligned} \tag{24.26}$$

例如，

$$\hat{\phi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)^{\cdot}\hat{\phi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau')^{\cdot} = -\mathcal{G}_{\alpha\beta}^0(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau'). \tag{24.27}$$

于是，推广的 Wick 定理断言，方程 (24.24) 等于所有可能的完全收缩项之和，即为

$$\begin{aligned} \langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}]\rangle_0 = {} & [\hat{A}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot}\hat{C}^{\cdot\cdots}\cdots\hat{F}^{\cdots}] \\ & + [\hat{A}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot\cdot}\hat{C}^{\cdot}\cdots\hat{F}^{\cdots}] + \cdots, \end{aligned} \tag{24.28}$$

这里 $[\hat{A}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot\cdot}\hat{C}^{\cdot}\cdots\hat{F}^{\cdots}]$ 应解释为 $\pm[\hat{A}^{\cdot}\hat{C}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot\cdots}\cdots\hat{F}^{\cdots}]$. 显然只要在算符已经按应有的时间 ($\tau$) 顺序排好的情况下证明方程(24.28)就足够了，因为可以在方程两边把算符重排而无需引入任何附加的符号改变. 因此我们要证明代数的恒等式

$$\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}\rangle_0 = [\hat{A}\cdot\hat{B}\cdot\hat{C}\cdots\cdot\hat{F}\cdots] + [\hat{A}\cdot\hat{B}\cdots\hat{C}\cdot\cdots\hat{F}\cdots] + \cdots, \quad (24.29)$$

它服从限制条件 $\tau_A > \tau_B > \tau_C > \cdots > \tau_F$，这限制使我们可以去掉方程 (24.28) 左边的符号 T_τ.

为了方便，给相互作用表象中的算符引入一个一般的记法，把方程 (24.21) 写成

$$\hat{\psi}_I \text{ 或 } \hat{\psi}_I^\dagger = \sum_j \chi_j(\mathbf{x}\tau)\alpha_j, \quad (24.30)$$

这里 α_j 表示 a_j 或 $a_j^\dagger$，而 $\chi_j(\mathbf{x}\tau)$ 表示 $\varphi_j^0(\mathbf{x})e^{-\epsilon_j\tau/\hbar}$ 或 $\varphi_j^0(\mathbf{x})^\dagger e^{\epsilon_j\tau/\hbar}$. 用了这种简化，方程 (24.29) 左边成为

$$\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}\rangle_0 = \sum_a \sum_b \sum_c \cdots \sum_f \chi_a\chi_b\chi_c\cdots\chi_f \times \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0}\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f). \quad (24.31)$$

既然 $\hat{K}_0$ 与 $\hat{N}$ 可对易，除非集合 $\{\alpha_a\cdots\alpha_f\}$ 含有相等数目的产生和消灭算符，否则迹为零；作为推论，算符总数必须是偶数. 将 α_a 一步又一步地对易到右边

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0}\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f\} &= \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0}[\alpha_a,\alpha_b]_\mp\alpha_c\cdots\alpha_f\} \pm \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0}\alpha_b[\alpha_a,\alpha_c]_\mp\cdots\alpha_f\} \\ &+ \cdots + \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0}\alpha_b\alpha_c\cdots[\alpha_a,\alpha_f]_\mp\} \\ &\pm \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0}\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f\alpha_a\}, \end{aligned} \quad (24.32)$$

这里像通常那样，上面（下面）的符号属于玻色子（费米子）. 这个对易式（反对易式）或是 1，或是 0，或是 −1 [比较方程 (1.27) 和 (1.48)]，这取决于所涉及的具体算符，因此可以拿到迹的外面. 另外，方程 (23.26) 的简单推广表明

$$e^{\beta\hat{K}_0}\alpha_a e^{-\beta\hat{K}_0} = \alpha_a e^{\lambda_a\beta\epsilon_a}, \quad (24.33)$$

这里如 α_a 是产生算符则 $\lambda_a = 1$，如 α_a 是消灭算符则 $\lambda_a = -1$. 这个关系式等价于方程

$$\alpha_a\hat{\rho}_{G0} = \hat{\rho}_{G0}\alpha_a e^{\lambda_a\beta\epsilon_a}, \quad (24.34)$$

而方程(24.32)的最后一项可用迹的轮换性质改写为

$$\pm \mathrm{Tr}(\alpha_a \hat{\rho}_{G0} \alpha_b \alpha_c \cdots \alpha_f)$$
$$= \pm e^{\lambda_a \beta \varepsilon_a} \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_a \alpha_b \alpha_c \cdots \alpha_f). \tag{24.35}$$

按这样的方式，方程(24.32)和(24.35)导致重要结果

$$\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_a \alpha_b \alpha_c \cdots \alpha_f)$$
$$= \frac{[\alpha_a, \alpha_b]_{\mp}}{1 \mp e^{\lambda_a \beta \varepsilon_a}} \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_c \cdots \alpha_f)$$
$$\pm \frac{[\alpha_a, \alpha_c]_{\mp}}{1 \mp e^{\lambda_a \beta \varepsilon_a}} \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_b \cdots \alpha_f) + \cdots$$
$$+ \frac{[\alpha_a, \alpha_f]_{\mp}}{1 \mp e^{\lambda_a \beta \varepsilon_a}} \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_b \alpha_c \cdots). \tag{24.36}$$

定义收缩如下，

$$\overbrace{\alpha_a \alpha_b} = \frac{[\alpha_a, \alpha_b]_{\mp}}{1 \mp e^{\lambda_a \beta \varepsilon_a}}, \tag{24.37}$$

方程(24.36)可取得更紧凑的形式，我们求得

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_a \alpha_b \alpha_c \cdots \alpha_f) &= \overbrace{\alpha_a \alpha_b} \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_c \cdots \alpha_f) \\ &\quad \pm \overbrace{\alpha_a \alpha_c} \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_b \cdots \alpha_f) + \cdots \\ &\quad + \overbrace{\alpha_a \alpha_f} \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \alpha_b \alpha_c \cdots), \\ &= \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \overbrace{\alpha_a \alpha_b} \alpha_c \cdots \alpha_f) \\ &\quad + \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \overbrace{\alpha_a \alpha_b} \alpha_c \cdots \alpha_f) + \cdots \\ &\quad + \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{G0} \overbrace{\alpha_a \alpha_b} \alpha_c \cdots \alpha_i),\end{aligned} \tag{24.38}$$

这里定义了含有收缩的算符表达式的迹. 实际上，大多数项为零，在方程(24.38)中两个编时算符之间的非零收缩只有

$$\begin{cases} \overbrace{a_j^{\dagger} a_j} = \dfrac{[a_j^{\dagger}, a_j]_{\mp}}{1 \mp e^{\beta \varepsilon_j}} = \dfrac{\mp 1}{1 \mp e^{\beta \varepsilon_j}} = \dfrac{1}{e^{\beta \varepsilon_j} \mp 1} = n_j^0, \\ \overbrace{a_j a_j^{\dagger}} = \dfrac{[a_j, a_j^{\dagger}]_{\mp}}{1 \mp e^{-\beta \varepsilon_j}} = \dfrac{1}{1 \mp e^{-\beta \varepsilon_j}} = 1 \pm n_j^0. \end{cases} \tag{24.39}$$

这两个收缩也都等于同样的算符的系综平均，又因为 $\tau_A > \tau_B > \tau_c > \cdots > \tau_F$ 我们就得到很一般的结论

$$\alpha_a\alpha_b = \langle \alpha_a\alpha_b \rangle_0 = \langle T_\tau[\alpha_a\alpha_b] \rangle_0. \tag{24.40}$$

方程 (24.31) 和 (24.38) 的结合给出

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F} \rangle_0 \\
&= \sum_a \sum_b \sum_c \cdots \sum_f \chi_a\chi_b\chi_c\cdots\chi_f \\
&\quad \times \{ \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{G0}\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f] + \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{G0}\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f] + \cdots \\
&\quad + \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{G0}\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f] \} \\
&= \langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F} \rangle_0 + \langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F} \rangle_0 + \cdots \\
&\quad + \langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F} \rangle_0.
\end{aligned} \tag{24.41}$$

收缩是 c 数，可以拿到迹的外面，留下一个与原来所考虑的形式相类似的结构．再次应用同样的分析，因而得到结论

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F} \rangle_0 &= \langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\cdots\hat{F}\cdots \rangle_0 \\
&\quad + \langle \hat{A}\hat{B}\cdots\hat{C}\cdots\hat{F}\cdots \rangle_0 + \cdots,
\end{aligned} \tag{24.42}$$

其中 $\tau_A > \tau_B > \tau_C > \cdots > \tau_F$．根据假定，左边是编时的，因而可以写作 $\langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}] \rangle_0$，这就证明了方程 (24.28)．

这里的证明表明 Wick 定理的有限温度形式是很一般的，它描述在外势中的有限系统以及具有平移不变性的无限系统．唯一的假定是存在不含时间的单粒子哈密顿函数 $\hat{H}_0$，它决定了统计算符 $e^{\beta(\Omega_0 - \hat{K}_0)}$．为确定起见，我们只考虑了自耦合场，这时 $\hat{H}$ 只涉及单一类型的算符．但是，对于耦合着的几个场，也可以作出类似的证明，只要 $\hat{H}_0$ 是各自的场算符的二次项之和．在这种情况下，迹分解为几个因子，各涉及一个场，而且不同的场的算符之间的收缩恒为零．因此推广的 Wick 定理使我们可以研究处于热力学平衡的任意的相互作用系统．

2.5 图解分析

前面的分析表明温度 Green 函数 $\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')$ 的微扰级数与零温度的情况等同，仅有的差别是用 $\mathscr{G}^0$ 代替 G^0，以及对 τ 从 0 到 $\beta\hbar$ 的时间积分的区域是有限的。作为一个具体例子，考虑量 $\langle T_\tau[\hat{\phi}_\alpha(1)\hat{\phi}_\beta(2)\hat{\phi}_{\beta'}(2')\hat{\phi}^\dagger_{\alpha'}(1')]\rangle_0$，这里数字 1 表示变量 $(\mathbf{x}_1, \tau_1)$，下标 I 已经略去，因为所有下面的工作都是在相互作用图象中进行的. 场算符可用两种不同方式收缩，于是方程 (24.27) 给出

$$\begin{aligned}
&\langle T_\tau[\hat{\phi}_\alpha(1)\hat{\phi}_\beta(2)\hat{\phi}_{\beta'}(2')\hat{\phi}_{\alpha'}(1')]\rangle_0 \\
&\quad = \langle \hat{\phi}_\alpha(1)\hat{\phi}_\beta(2)\hat{\phi}^\dagger_{\beta'}(2')\hat{\phi}^\dagger_{\alpha'}(1')\rangle_0 \\
&\qquad + \langle \hat{\phi}_\alpha(1)\hat{\phi}_\beta(2)\hat{\phi}^\dagger_{\beta'}(2')\hat{\phi}^\dagger_{\alpha'}(1')\rangle_0 \\
&\quad = \mathscr{G}^0_{\alpha\alpha'}(1, 1')\mathscr{G}^0_{\beta\beta'}(2, 2') \\
&\qquad \pm \mathscr{G}^0_{\alpha\beta'}(1, 2')\mathscr{G}^0_{\beta\alpha'}(2, 1'). \qquad (25.1)
\end{aligned}$$

方程 (24.13) 的分子的每一项都可用类似的方法分析。既然有限温度 Wick 定理的代数结构 [方程 (24.28)] 等同于零温度形式的完全收缩项[方程 (8.32)]，温度 Green 函数 $\mathscr{G}$ 就具有 G 在零温度下所具有的同样的全部 Feynman 图解. 特定地说，一个给定的图解或是连接的或是不连接的，而方程 (24.13) 的分母精确地抵消掉不连接项的贡献，完全与第 9 节中一样. 其结果是温度 Green 函数具有与方程 (9.5) 相同的形式结构

$$\begin{aligned}
\mathscr{G}_{\alpha\beta}(1, 2) = -\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_0^{\beta\hbar} d\tau'_1 \cdots \int_0^{\beta\hbar} d\tau'_n \\
\times \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{G0} T_\tau[\hat{K}_1(\tau'_1)\cdots \\
\times \hat{K}_1(\tau'_n)\hat{\phi}_\alpha(1)\hat{\phi}^\dagger_\beta(2)]\}_{\text{连接}}, \qquad (25.2)
\end{aligned}$$

这里只保留连接图解. 对于 $\hat{K}_1 = \hat{H}_1$ 的任一个特定选择来

说，Feynman 规则的详细推导也没有改变，我们将只叙述最后的结果.

坐标空间中的 Feynman 规则

最通常的情况是自耦合场，其中 $\hat{H}_1$ 表示两粒子相互作用，

$$\hat{K}_1 \equiv \hat{H}_1 = \frac{1}{2}\iint d^3x_1 d^3x_2 \hat{\phi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x}_1)\hat{\phi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}_2) \times V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\hat{\phi}_\beta(\mathbf{x}_2)\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}_1), \tag{25.3}$$

这里 $V(\mathbf{x})$ 取作与自旋无关. 容易得到相应的相互作用图象的算符

$$\begin{aligned}\hat{K}_1(\tau_1) &= \frac{1}{2}\iint d^3x_1 d^3x_2 \hat{\phi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x}_1\tau_1)\hat{\phi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}_2\tau_1) \\ &\quad \times V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\hat{\phi}_\beta(\mathbf{x}_2\tau_1)\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}_1\tau_1) \\ &= \frac{1}{2}\iint d^3x_1 d^3x_2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_2 \hat{\phi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x}_1\tau_1)\hat{\phi}^\dagger_\beta(\mathbf{x}_2\tau_2) \\ &\quad \times \mathscr{V}_0(\mathbf{x}_1\tau_1, \mathbf{x}_2\tau_2)\hat{\phi}_\beta(\mathbf{x}_2\tau_2)\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}_1\tau_1),\end{aligned} \tag{25.4}$$

这里下标 I 再次略去，并引入了一般的势

$$\mathscr{V}_0(\mathbf{x}_1\tau_1, \mathbf{x}_2\tau_2) = V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\delta(\tau_1 - \tau_2). \tag{25.5}$$

方程 (25.2) 的微扰展开式包含着与第 9 节完全同样的 Feynman 图解，唯一的修改是用以计算 $\mathscr{G}_{\alpha\beta}(1,2)$ 的第 n 级贡献的 Feynman 规则.

1. 画出含有 n 根相互作用线和 $2n+1$ 根有向粒子线的所有拓扑不等价的图解.

2. 每根从 2 指向 1 的有向粒子线与一个因子 $\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(1,2)$ 相联系.

3. 每根连接 1 和 2 点的相互作用线与一个因子 $\mathscr{V}_0(1,2)$ 相联系.

4．对所有的内变量积分：$\int d^3x_i \int_0^{\beta\hbar} d\tau_i$.

5．沿着任一连续粒子线，指标构成矩阵积．计算对所有自旋的求和

6．每一个第 n 级图解乘以 $(-1/\hbar)^n(-1)^F$，F 是闭合费米子环的数目

7．凡 τ 值相等的温度 Green 函数均应如下理解，

$$\mathscr{G}^0(\mathbf{x}_i\tau_i, \mathbf{x}_j\tau_i) = \lim_{\tau_j \to \tau_i^+} \mathscr{G}^0(\mathbf{x}_i\tau_i, \mathbf{x}_j\tau_j).$$

作为一个特例，考虑所有零级和第一级项(图 25.1)．内

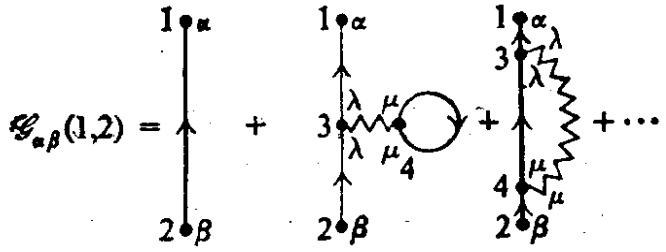


图 25.1　在坐标空间中的对 $\mathscr{G}_{\alpha\beta}(1,2)$ 的零级和第一级贡献．

线的标记的具体选择是无所谓的，因为它们是傀变量．按照刚才叙述过的规则，图 25.1 意味着下列这些项：

$$\begin{aligned}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(1,2) = \mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(1,2) - \hbar^{-1}\int d^3x_3 d^3x_4 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_3 d\tau_4 \\ \times [\pm \mathscr{G}^0_{\alpha\lambda}(1,3)\mathscr{G}^0_{\lambda\beta}(3,2)\mathscr{G}^0_{\mu\mu}(4,4)\mathscr{V}_0(3,4) \\ + \mathscr{G}^0_{\alpha\lambda}(1,3)\mathscr{G}^0_{\lambda\mu}(3,4) \\ \times \mathscr{G}^0_{\mu\beta}(4,2)\mathscr{V}_0(3,4)] + \cdots, \qquad (25.6)\end{aligned}$$

第二项前的±来源于闭合的环线．如果 $\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}$ 按自旋指标说是对角的 [$=\mathscr{G}^0\delta_{\alpha\beta}$]，则 $\mathscr{G}$ 也是对角的，而对自旋的求和就容易算出，

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(1,2) = \mathscr{G}^0(1,2) - \hbar^{-1}\int d^3x_3 d^3x_4 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_3 d\tau_4 \\ \times [\pm(2s+1)\mathscr{G}^0(1,3)\mathscr{G}^0(3,2)\mathscr{G}^0(4,4)\end{aligned}$$

$$\times \mathscr{V}_0(3,4) + \mathscr{G}^0(1,3)\mathscr{G}^0(3,4)$$
$$\times \mathscr{G}^0(4,2)\mathscr{V}_0(3,4)] + \cdots. \qquad (25.7)$$

这里因子 $(2s+1)$ 是自旋为 s 的粒子的简并度. 如规则 7 所指出，$\mathscr{G}^0(4,4)$ 应理解为 $\mathscr{G}^0(4,4^+)$. 它也可指认为广义的粒子密度

$$\mathscr{G}^0(4,4^+) = \mp(2s+1)^{-1}\langle\hat{n}^0(\mathbf{x}_4)\rangle_0$$
$$= \mp(2s+1)^{-1}\sum_j |\varphi_j^0(\mathbf{x}_4)|^2(e^{\beta(\varepsilon_j^0-\mu)}\mp 1)^{-1}, \qquad (25.8)$$

这依赖于参数 μ；因此它不同于未微扰的粒子密度，除非给 μ 指定一个适合于无相互作用系统的值.

动量空间中的 Feynman 规则

详细地写出方程 (25.7) 并无困难，但是对于 $\tau_i \gtrless \tau_j$，$\mathscr{G}^0(i,j)$ 的形式不同，这立即导致项数急增. 基于这一理由，就变量 τ 引入 Fourier 表示是有利的，这自动地包括了不同的顺序. 这一步曾经是有限温度下的多体理论发展的核心，它是由 Abrikosov、Gorkov、和 Dzyaloshinskii[1], Fradkin[2], Martin 和 Schwinger[3] 各自独立引入的. 它导致与零温度理论相同的简化.

关键是 $\mathscr{G}$ 对于各个 τ 变量是周期性(反周期性)的，其周期为 $\beta\hbar$ [方程 (24.14) 和 (24.15)]. 为简单起见，我们假定 $\mathscr{G}$ 只依赖于差值 $\tau_1 - \tau_2$，而这是最常见的情况:

$$\mathscr{G}(\mathbf{x}_1\tau_1, \mathbf{x}_2\tau_2) = \mathscr{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2). \qquad (25.9)$$

---

1) A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinskii, *Sov. Phys.-JETP*, **9**: 636 (1959).
2) E. S. Fradkin, *Sov. Phys.-JETP*, **9**: 912 (1959).
3) P. C. Martin and J. Schwinger, *Phys. Rev.*, **115**: 1342 (1959).

对于两种统计，$\mathcal{G}$ 在区间 $2\beta\hbar$ 上都是周期的，因此可展为 Fourier 级数

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau) = (\beta\hbar)^{-1}\sum_n e^{-i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \omega_n)$$

$$(\tau \equiv \tau_1 - \tau_2), \tag{25.10}$$

其中

$$\omega_n = \frac{n\pi}{\beta\hbar}. \tag{25.11}$$

这个表示保证 $\mathcal{G}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2, \tau + 2\beta\hbar) = \mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau)$，而相应的 Fourier 系数由下式给出

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \omega_n) = \frac{1}{2}\int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau). \tag{25.12}$$

为了方便，把方程 (25.12) 分成两部份

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \omega_n) &= \frac{1}{2}\int_{-\beta\hbar}^{0} d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau)\\ &\quad + \frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau)\\ &= \pm\frac{1}{2}\int_{-\beta\hbar}^{0} d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau + \beta\hbar)\\ &\quad + \frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau)\\ &= \frac{1}{2}(1 \pm e^{-i\omega_n\beta\hbar})\\ &\quad \times \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau),\end{aligned} \tag{25.13}$$

这里第二行和第三行是分别用了方程 (24.15) 和一个初等的变数变换而得到的. 方程(25.11)表明 $e^{-i\omega_n\beta\hbar}$ 等于 $e^{-in\pi} = (-1)^n$，因子 $(1 \pm e^{-i\omega_n\beta\hbar})/2$ 成为

$$\frac{1}{2}[1\pm(-1)^n]=\begin{cases}1 & (n\text{ 偶数})\\ 0 & (n\text{ 奇数})\end{cases}\Big\}\text{玻色子}$$
$$\qquad\qquad\begin{cases}0 & (n\text{ 偶数})\\ 1 & (n\text{ 奇数})\end{cases}\Big\}\text{费米子}.$$

因此我们可以改写 Fourier 系数[方程(25.12)]

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\omega_n)=\int_0^{\beta\hbar}d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\tau),\quad(25.14)$$

其中

$$\omega_n=\begin{cases}\dfrac{2n\pi}{\beta\hbar} & (\text{玻色子}),\\ \dfrac{(2n+1)\pi}{\beta\hbar} & (\text{费米子}).\end{cases}\quad(25.15)$$

因而对于玻色子(费米子),方程(25.10)中的 Fourier 级数限于偶数(奇数)项.

无相互作用的 Green 函数[方程(24.22)]提供了方程(25.14)的一个有意义的例子. 最简单的办法是分别处理玻色子和费米子. 先考虑玻色子,

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n)&=-\sum_j\varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^\dagger\\ &\quad\times\int_0^{\beta\hbar}d\tau e^{i\omega_n\tau}e^{-(\epsilon_j^0-\mu)\tau/\hbar}(1+n_j^0)\\ &=-\sum_j\frac{\varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^\dagger(1+n_j^0)}{i\omega_n-\hbar^{-1}(\epsilon_j^0-\mu)}\\ &\quad\times\{\exp[i\omega_n\beta\hbar-\beta(\epsilon_j^0-\mu)]-1\}.\end{aligned}\quad(25.16)$$

条件 $\omega_n=2n\pi/\beta\hbar$ 把曲括号中的量化成

$$\{\exp[-\beta(\epsilon_j^0-\mu)]-1\}=-(1+n_j^0)^{-1},$$

于是方程(25.16)成为

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n)=\sum_j\frac{\varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^\dagger}{i\omega_n-\hbar^{-1}(\epsilon_j^0-\mu)}.\quad(25.17)$$

对费米子的分析是非常类似的:

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = -\sum_j \frac{\varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^\dagger(1-n_j^0)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\varepsilon_j^0 - \mu)} \times \{e^{i\omega_n\beta\hbar}\exp[-\beta(\varepsilon_j^0 - \mu)] - 1\}, \tag{25.18}$$

这里 $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta\hbar$. 曲括号中的量又简化为

$$-\{\exp[-\beta(\varepsilon_j^0 - \mu)] + 1\} = -(1-n_j^0)^{-1},$$

可以看出方程 (25.17) 对两种统计都是正确的，唯一的差别是方程 (25.15) 关于偶整数或奇整数的限制。

为了得到动量空间中的 Feynman 规则，我们考虑对方程 (25.2) 有贡献的 Feynman 图解中一个任意的顶点. 静态两体势具有平凡的 Fourier 表示

$$\mathcal{V}_0(\mathbf{x}_1\tau_1, \mathbf{x}_2\tau_2) = (\beta\hbar)^{-1}\sum_{n\text{偶数}} e^{-i\omega_n(\tau_1-\tau_2)}\mathcal{V}_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\omega_n), \tag{25.19}$$

其中

$$\mathcal{V}_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \omega_n) \equiv V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \tag{25.20}$$

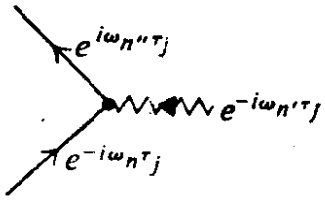


图 25.2 在温度理论中的基本顶点

这里我们用到在区间 $-\beta\hbar < \tau < \beta\hbar$ 上成立的恒等式

$$\delta(\tau) = (\beta\hbar)^{-1}\sum_{n\text{偶数}} e^{-i\omega_n\tau}. \tag{25.21}$$

每一个内顶点连接着一根相互作用线和两根粒子线（一根进而一根出），如图 25.2. 对 τ_j 的依赖关系全包含于图 25.2 所示的指数函数因子上，对 τ_j 的积分成为

$$\int_0^{\beta\hbar} d\tau_j \exp[-i(\omega_n + \omega_{n'} - \omega_{n''})\tau_j] = \beta\hbar\delta_{\omega_n+\omega_{n'},\omega_{n''}}. \tag{25.22}$$

方程(25.22)表明：分立的频率在每一顶点守恒，完全象方程(9.13)中的连续频率一样．注意这个条件与统计无关，因为两根粒子线携带偶数或奇数的频率，而相互作用线总是携带偶数频率．

对 $\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \omega_n)$ 的第 n 级贡献的 Feynman 规则的推导，现在已是直截了当的了，这些规则可应用于非均匀系统，例如周期晶体势场中的电子气体．然而，对大多数情形来说，最好限于具有平移不变性的系统，这时 $\mathscr{G}$ 仅依赖于空间变量之差 $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$．在这种情况下，可在动量空间中算出 Feynman 图解，这使计算大为简化．根据第 9 节中的分析以及方程(23.30)立即得到 Feynman 的变换规则．为了简单，只考虑体积趋于无限大 $(V \to \infty)$ 的极限情形，于是温度 Green 函数可如下展开：

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = (\beta\hbar)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \times \sum_n e^{-i\omega_n\tau}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega_n), \tag{25.23}$$

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = (\beta\hbar)^{-1}\delta_{\alpha\beta}\int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \times \sum_n e^{-i\omega_n\tau}[i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon^0_k - \mu)]^{-1}. \tag{25.24}$$

物理量 N、E 和 Ω［见方程(23.9)、(23.15)和(23.22)］成为

$$N = \mp V(2\pi)^{-3}(\beta\hbar)^{-1}\int d^3k \sum_n e^{i\omega_n\tau}\mathrm{tr}\mathscr{G}(\mathbf{k}, \omega_n), \tag{25.25}$$

$$E = \langle\hat{H}\rangle = \mp V(2\pi)^{-3}(\beta\hbar)^{-1}\int d^3k \sum_n e^{i\omega_n\eta} \times \frac{1}{2}(i\hbar\omega_n + \epsilon^0_k + \mu)\mathrm{tr}\,\mathscr{G}(\mathbf{k}, \omega_n), \tag{25.26}$$

$$\Omega = \Omega_0 \mp V\int_0^1 \lambda^{-1}d\lambda(2\pi)^{-3}(\beta\hbar)^{-1}\int d^3k \sum_n e^{i\omega_n\eta}$$

$$\times \frac{1}{2}(i\hbar\omega_n - \varepsilon_k^0 + \mu)\,\mathrm{tr}\mathscr{G}^{\lambda}(\mathbf{k},\omega_n), \qquad (25.27)$$

现在我们叙述计算 $\mathscr{G}(\mathbf{k},\omega_m)$ 的第 n 级贡献的 Feynman 规则.

1．画出具有 n 根相互作用线和 $2n+1$ 根有向粒子线的所有拓扑不等价的连结图形.

2．对每根相互作用线指定一个方向．每根线各与一个波矢量和分立的频率相联系，这两个量在每个顶点守恒.

3．每一根粒子线与一个因子

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega_m) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{i\omega_m - \hbar^{-1}(\varepsilon_k^0 - \mu)} \qquad (25.28)$$

相联系，这里对于玻色子(费米子)，ω_m 包括偶(奇)整数.

4．每一根相互作用线与一个因子 $\mathscr{V}_0(\mathbf{k},\omega_m) \equiv V(\mathbf{k})$ 相联系.

5．对所有 n 个独立的内波矢量积分，对所有 n 个独立的内频率求和.

6．沿着任一连续粒子线，指标构成矩阵积．算出所有的矩阵和.

7．乘以 $[-\beta\hbar^2(2\pi)^3]^{-n}(-1)^F$，$F$ 是闭合的费米子环的数目.

8．每当粒子线或是自我闭合或是被同一根相互作用线连接，都要插进一个收敛因子 $e^{i\omega_m\eta}$.

作为例子，我们再次考虑零级和第一级图解（图 25.3）．算出对自旋的求和后，求得

$$\mathscr{G}(\mathbf{k},\omega_n) = \mathscr{G}^0(\mathbf{k},\omega_n) - (\beta\hbar^2)^{-1}[\mathscr{G}^0(\mathbf{k},\omega_n)]^2(2\pi)^{-3}$$
$$\times \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta}\int d^3k'[\pm(2s+1)V(0)\mathscr{G}^0(\mathbf{k}',\omega_{n'})$$
$$+ V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathscr{G}^0(\mathbf{k}',\omega_{n'})] + \cdots. \qquad (25.29)$$

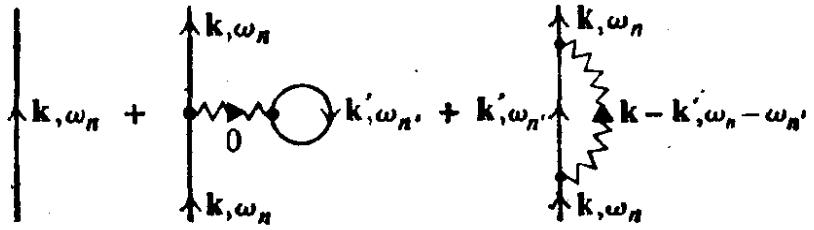


图 25.3　动量空间中对 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$ 的零级和第一级贡献

这个表示式的形式 [比较方程 (9.22)] 是可以预料到的，

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) + \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) \times \Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n), \tag{25.30}$$

这里 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)$ 是自能. 特别是，第一级自能由下式给出 [比较方程 (9.23)]

$$\begin{aligned}\Sigma_{(1)}(\mathbf{k}, \omega_n) &\equiv \Sigma_{(1)}(\mathbf{k}) \\ &= (-\beta\hbar^2)^{-1}\sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta}(2\pi)^{-3}\int d^3k'\mathcal{G}^0(\mathbf{k}', \omega_{n'}) \\ &\quad \times [\pm(2s+1)V(0) + V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] \\ &= \frac{1}{\hbar}\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}[\mp(2s+1)V(0) - V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] \\ &\quad \times \frac{1}{\beta\hbar}\sum_{n'}\frac{e^{i\omega_{n'}\eta}}{i\omega_{n'} - \hbar^{-1}(\varepsilon^0_{k'} - \mu)}.\end{aligned} \tag{25.31}$$

显然 $\Sigma_{(1)}$ 与 ω_n 无关，因而可写成 $\Sigma_{(1)}(\mathbf{k})$.

对频率求和的计算

方程 (25.31) 中的频率求和，在多体物理中是典型的，所以我们将详细地研究它. 为确定起见，考虑玻色子的情况，这里求和具有形式

$$\sum_n e^{i\omega_n\eta}(i\omega_n - x)^{-1}, \tag{25.32}$$

而 $\omega_n = 2n\pi/\beta\hbar$. 方程 (25.32) 不是绝对收敛的，因为假如没有收敛因子，它将对数式地发散；因此，在求和算出之前，η 必

须保持为正的.

最直接的方法是用迴路积分，这需要一个在偶整数有极点的半纯函数. 一个可能的选择是 $\beta\hbar(e^{\beta\hbar z}-1)^{-1}$，其极点位于 $z=2n\pi i/\beta\hbar=i\omega_n$，各极点的留数均为 1. 如果 C 是沿正向包围虚轴的一个迴路 (图 25.4)，则迴路积分

$$\frac{\beta\hbar}{2\pi i}\int_C \frac{dz}{e^{\beta\hbar z}-1}\frac{e^{\eta z}}{z-x} \tag{25.33}$$

恰好重现方程(25.32)中的和，因为被积函数有无限序列的单极点，它们在 $i\omega_n$，留数是 $(\beta\hbar)^{-1}e^{i\omega_n\eta}(i\omega_n-x)^{-1}$. 如图 25.4 所示，把迴路变形到 C' 和 Γ. 如果令 $|z|$ 沿着 $\mathrm{Re}z>0$ 的某一射线趋向于无限大，则被积函数为 $|z|^{-1}\exp[-(\beta\hbar-\eta)\,\mathrm{Re}z]$ 的数量级；如果令 $|z|$ 沿着 $\mathrm{Re}z<0$ 的某一射线趋向于无限大，则被积函数为 $|z|^{-1}\exp(\eta\,\mathrm{Re}z)$ 的数量级. 既然 $\beta\hbar>\eta>0$，

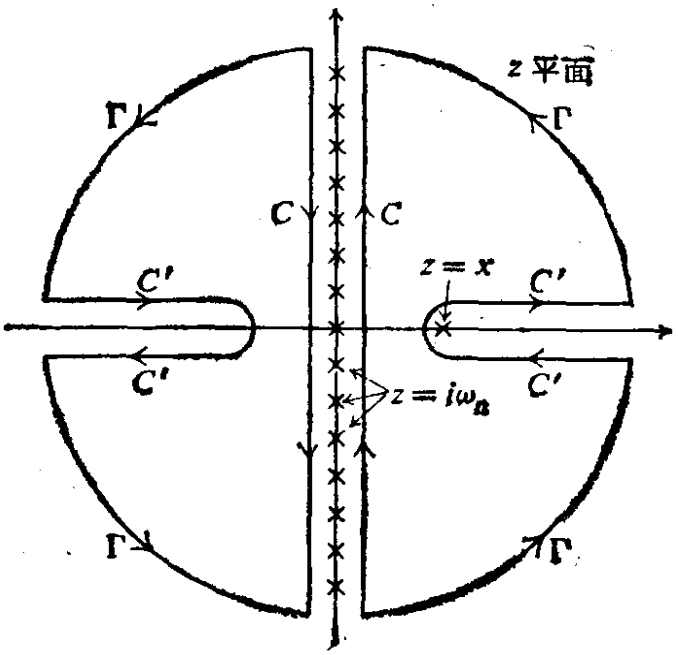


图 25.4　计算频率求和的迴路

Jordan 引理表明大弧 Γ 的贡献为零，只剩下沿 C' 的积分

$$\sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x}=\frac{\beta\hbar}{2\pi i}\int_{C'}\frac{dz}{e^{\beta\hbar z}-1}\frac{e^{\eta z}}{z-x}. \tag{25.34}$$

C' 所包含的唯一奇点是 $z=x$ 处的单极点，而 Cauchy 定理给出

$$\lim_{\eta\to 0}\sum_{n\text{偶数}}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x}=\frac{-\beta\hbar}{e^{\beta\hbar x}-1}, \tag{25.35}$$

这里负号是由于迴路 C' 是负方向的，现在可以令 $\eta\to 0$ 了。这个推导显示，收敛因子的作用是很重要的。虽然函数 $-\beta\hbar(e^{-\beta\hbar z}-1)^{-1}$ 在 $z=i\omega_n$ 也有单极点，且留数为 1，但在这情况下，来自 Γ 上的贡献将是发散的，这样就不允许从 C 变形为 C'。

对于费米子可以给出类似的分析，这时 $\omega_n=(2n+1)\pi/\beta\hbar$。函数 $-\beta\hbar(e^{\beta\hbar z}+1)^{-1}$ 在奇整数 $z=i\omega_n$ 有单极点，且留数为 1，级数可改写为

$$\sum_{n\text{奇数}}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x}=\frac{-\beta\hbar}{2\pi i}\int_C\frac{dz}{e^{\beta z}+1}\frac{e^{\eta z}}{z-x}, \tag{25.36}$$

这里 C 是与图 25.4 中的相同的迴路。Jordan 引理再次允许迴路从 C 变形为 C'，因为 $\beta\hbar>\eta>0$，而在 $z=x$ 的单极点给出

$$\lim_{\eta\to 0}\sum_{n\text{奇数}}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x}=\frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar x}+1}. \tag{25.37}$$

这两种情况可合并为一个表示式

$$\lim_{\eta\to 0}\sum_{n}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x}=\mp\frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar x}\mp 1}, \tag{25.38}$$

在下面各章中将反复用到这个公式。

现在可用方程 (25.38) 把第一级自能 [方程 (25.31)] 简化而求得

$$\hbar\Sigma_{(1)}(\mathbf{k})=\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{[(2s+1)V(0)\pm V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')]}{\exp[\beta(\varepsilon^0_{k'}-\mu)]\mp 1}$$

$$=V(0)(2s+1)(2\pi)^{-3}\int d^3k'n^0_{k'}\pm(2\pi)^{-3}$$

$$\times \int d^3k' V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') n^0_{\mathbf{k}'}. \qquad (25.39)$$

这个表示式适用于一切温度下的费米子，也适用于玻色子，只是要求温度足够高，致使未微扰的玻色子系统没有 Bose-Einstein 凝聚现象. 重要的是记住 $n^0_{\mathbf{k}}$ 显含化学势 μ. 由于这个原因，$(2s+1)(2\pi)^{-3}\int d^3k n^0_{\mathbf{k}}$ 也是 μ 的函数而不能认为它就是粒子密度. 但是，除了这一差别以外，方程 (25.39) 是零温度第一级自能 [方程 (9.24)] 的直接推广.

26. Dyson 方程

零温度下的 Dyson 方程的结构由所有 Feynman 图解的集合所决定. 上节表明，温度 Green 函数导致等同的图解集合，因此，Dyson 方程保持不变是不足为奇的. 确实，这正是引入温度 Green 函数的首要原因，即使 $\mathcal{G}$ 与物理量的联系不像类似的零温度函数 G 那么直接. 在坐标空间中，温度 Green 函数总具有下列形式[比较第 9 节]

$$\mathcal{G}(1,2) = \mathcal{G}^0(1,2) + \int d3 \times \int d4\,\mathcal{G}^0(1,3)\Sigma(3.4)\mathcal{G}^0(4.2), \qquad (26.1)$$

这里积分隐含着对自旋的求和以及 τ_i 从 0 到 $\beta\hbar$ 的时间积分. 方程 (26.1) 定义了总自能 $\Sigma(3,4)$；引进正规自能 $\Sigma^\star(3,4)$ 也是方便的，正规自能是由不能通过割断一根粒子线 $\mathcal{G}^0$ 使其分成两部份的全部自能图解所组成. 如在零温度理论中那样 [方程 (9.26)]，自能可通过正规自能的迭代而得到

$$\Sigma(1,2) = \Sigma^\star(1,2) + \int d3 \times d4\,\Sigma^\star(1,3)\mathcal{G}^0(3,4)\Sigma^\star(4.2) + \cdots, \qquad (26.2)$$

相应的温度 Green 函数遵从 Dyson 积分方程

$$\mathcal{G}(1,2)=\mathcal{G}^0(1,2)+\int d3 \times \int d4\mathcal{G}^0(1,3)\Sigma^*(3,4)\mathcal{G}^0(4,2). \quad (26.3)$$

方程(26.3)的迭代显然重现方程(26.1)和(26.2).

如果哈密顿函数不含时间,而且系统是均匀的,则 Dyson 方程要简单得多. 虽然对空间变化的系统写出[对应于 Green 函数 $\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \omega_n)$的] Dyson 方程的表达式是容易的,但是我们将集中注意可能有完全的 Fourier 表示的更为常见的情况 [见方程(25.23)和(25.24)]. 于是容易算出方程(26.3)中的求和和积分,剩下代数方程

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) + \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) \times \Sigma^*(\mathbf{k},\omega_n)\mathcal{G}(\mathbf{k},\omega_n), \quad (26.4)$$

这里假定所有的量对矩阵指标都是对角的. 方程(26.4)有显式解

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = [\mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n)^{-1} - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n)]^{-1},$$
$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega_n) = \delta_{\alpha\beta}[i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) - \Sigma^*(\mathbf{k},\omega_n)]^{-1}, \quad (26.5)$$

这最后的形式是用方程(25.28)得到的. $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$的这个表达式从形式上看非常类似于 $G(\mathbf{k})$ 的方程(9.33). 但是,有一个重要的差别,因为 ω_n 是分立的变量,而不是真正的频率或能量. 由于这个原因,要确定系统增添一个或减少一个粒子时的激发谱 $\epsilon_\mathbf{k}$,就会比在 $T = 0$ 时复杂,我们将在第九章回到这个重要问题.

前述 N、E 和 Ω 的表示式[方程(25.25)到(25.27)]可用 Dyson 方程简化:

$$N(T, V, \mu) = \mp V(2s + 1)\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}$$

$$\times \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\varepsilon_k^0 - \mu) - \sum^{\star}(\mathbf{k}, \omega_n)}, \quad (26.6)$$

$$E(T, V, \mu)$$
$$= \mp V(2s+1)\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n e^{i\omega_n\eta}$$
$$\times \frac{1}{2}\hbar\left[\frac{i\omega_n + \hbar^{-1}(\varepsilon_k^0 + \mu)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\varepsilon_k^0 - \mu) - \sum^{\star}(\mathbf{k}, \omega_n)}\right]$$
$$= \mp V(2s+1)\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n e^{i\omega_n\eta}$$
$$\times \left[\frac{1}{2}\hbar + \frac{\varepsilon_k^0 + \frac{1}{2}\hbar\sum^{\star}(\mathbf{k}, \omega_n)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\varepsilon_k^0 - \mu) - \sum^{\star}(\mathbf{k}, \omega_n)}\right], \quad (26.7)$$

$$\Omega(T, V, \mu)$$
$$= \Omega_0(T, V, \mu) \mp V(2s+1)$$
$$\times \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n e^{i\omega_n\eta}$$
$$\times \left[\frac{1}{2}\hbar + \frac{\frac{1}{2}\hbar\sum^{\star\lambda}(\mathbf{k}, \omega_n)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\varepsilon_k^0 - \mu) - \sum^{\star\lambda}(\mathbf{k}, \omega_n)}\right]. \quad (26.8)$$

收敛因子再次起了重要的作用，因为它使我们可以消去最后两个式子中的常数项．为确定起见，考虑玻色子，这里

$$\sum_n e^{i\omega_n\eta} = \sum_n e^{2\pi i n\eta/\beta\hbar}$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty}(e^{2\pi i\eta/\beta\hbar})^n + \sum_{n=0}^{\infty}(e^{2\pi i\eta/\beta\hbar})^{-n} - 1$$
$$= (1 - e^{2\pi i\eta/\beta\hbar})^{-1} + (1 - e^{-2\pi i\eta/\beta\hbar})^{-1} - 1$$
$$= 0. \quad (26.9)$$

第二行不过是几何级数的和，最后一行则由于 $0 < \eta < \beta\hbar$.

[比较方程(9.6)后面的讨论.] 费米子的求和只差一个因子 $e^{\pi i\eta/\beta\hbar}$，因而方程(26.7)和(26.8)成为

$$E = \mp V(2s+1)(2\pi)^{-3}(\beta\hbar)^{-1}\int d^3k \times \sum_n e^{i\omega_n\eta}\left[\varepsilon_k^0 + \frac{1}{2}\hbar\Sigma^*(\mathbf{k},\omega_n)\right]\mathcal{G}(\mathbf{k},\omega_n), \tag{26.10}$$

$$\Omega = \Omega_0 \mp V(2s+1)\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n e^{i\omega_n\eta} \times \frac{1}{2}\hbar\Sigma^{*\lambda}(\mathbf{k},\omega_n)\mathcal{G}^\lambda(\mathbf{k},\omega_n), \tag{26.11}$$

这里 $\Sigma^{*\lambda}$ 和 $\mathcal{G}^\lambda$ 两者都必须就可变的耦合常数 λ 算出.

完全像在方程(9.39)中那样，引入极化 Π 和有效相互作用 $\mathcal{V}$ 也是有益的. 在现在的情况下，粒子间的势与自旋无关，均匀系统的 $\mathcal{V}(\mathbf{q},\omega_n)$ 满足代数表示式

$$\mathcal{V}(\mathbf{q},\omega_n) = \mathcal{V}_0(\mathbf{q},\omega_n) + \mathcal{V}_0(\mathbf{q},\omega_n) \times \Pi(\mathbf{q},\omega_n)\mathcal{V}_0(\mathbf{q},\omega_n). \tag{26.12}$$

如果正规极化 Π^* 被定义为一切不能通过割断一根相互作用线 $\mathcal{V}_0$ 使其分成两部份的极化插入图形之和，则方程(26.12)可改写成[比较方程(9.43b)]

$$\mathcal{V}(\mathbf{q},\omega_n) = \mathcal{V}_0(\mathbf{q},\omega_n) + \mathcal{V}_0(\mathbf{q},\omega_n) \times \Pi^*(\mathbf{q},\omega_n)\mathcal{V}(\mathbf{q},\omega_n), \tag{26.13}$$

其显式解为

$$\mathcal{V}(\mathbf{q},\omega_n) = \mathcal{V}_0(\mathbf{q},\omega_n)[1 - \mathcal{V}_0(\mathbf{q},\omega_n) \times \Pi^*(\mathbf{q},\omega_n)]^{-1}. \tag{26.14}$$

虽然这个方程类似于 $T=0$ 的方程[方程(9.45)]，但是分立的频率 ω_n 排除了把 $\mathcal{V}(\mathbf{q},\omega_n)$ 直接解释为在给定动量和能量转移下的有效的物理的相互作用. 这样，在有限温度下，要确定与密度振荡相联系的集体模，需要较仔细的分析，这将在

第九章给出.

习　　题

7.1　定义两粒子温度 Green 函数为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{x}_1\tau_1, \mathbf{x}_2\tau_2; \mathbf{x}_1'\tau_1', \mathbf{x}_2'\tau_2') = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G T_\tau[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}_1\tau_1)\hat{\psi}_{K\beta}(\mathbf{x}_2\tau_2) \times \hat{\psi}^\dagger_{K\delta}(\mathbf{x}_2'\tau_2')\hat{\psi}^\dagger_{K\gamma}(\mathbf{x}_1'\tau_1')]\}.$$

试证两体相互作用能的系综平均值是

$$\langle\hat{V}\rangle = \frac{1}{2}\int d^3x \int d^3x' V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')_{\mu'\lambda',\mu\lambda}\mathscr{G}_{\lambda\lambda';\mu\mu'} \times (\mathbf{x}'\tau, \mathbf{x}\tau; \mathbf{x}'\tau^+, \mathbf{x}\tau^+).$$

7.2　考虑外势 $U(\mathbf{x})$ 中的多体系统，其相互作用势 $V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ 与自旋无关. 试证明，严格的单粒子温度 Green 函数遵从下列运动方程

$$\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau_1} + \frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} + \mu - U(\mathbf{x}_1)\right]\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1\tau_1, \mathbf{x}_1'\tau_1') \pm \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)\mathscr{G}_{\alpha\gamma;\beta\gamma}(\mathbf{x}_1\tau_1, \mathbf{x}_2\tau_1; \mathbf{x}_1'\tau_1', \mathbf{x}_2\tau_1^+) = \hbar\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1')\delta(\tau_1-\tau_1')\delta_{\alpha\beta},$$

这里两粒子 Green 函数已在习题 7.1 中定义.

7.3　假设在温度 T，有一个自旋为 1/2 的费米子均匀系统，试用动量空间中的 Feynman 规则，

(a) 写出在与自旋无关的相互作用的情况下对正规自能的第二级贡献.

(b) 计算对频率的求和.

7.4　考虑一个无相互作用粒子系统，处于外加静态势场中，外势的哈密顿函数 $\hat{H}^{ex} = \int d^3x\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x})V_{\alpha\beta}(\mathbf{x})\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x})$.

(a) 应用 Wick 定理计算温度 Green 函数到 $\hat{H}^{ex}$ 的第二

级项. 从而推导 $\mathscr{G}^{ex}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')$ 的 Feynman 规则到一切级.

(b) 定义 Fouri 变换式如下

$$\mathscr{G}^{ex}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = (\beta\hbar)^{-1}\iint(2\pi)^{-6}d^3k d^3k' e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}')} \times \sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\mathscr{G}^{ex}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega_n).$$

试求 $\mathscr{G}^{ex}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega_n)$ 到第二级，并从而得出动量空间中相应的 Feynman 规则.

(c) 试证，Dyson 方程成为

$$\mathscr{G}^{ex}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega_n) = \mathscr{G}^{0}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega_n)(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + (2\pi)^{-3}\hbar^{-1}\int d^3p\mathscr{G}^{0}_{\alpha\lambda}(\mathbf{k}, \omega_n) \times V_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}-\mathbf{p})\mathscr{G}^{ex}_{\lambda'\beta}(\mathbf{p}, \mathbf{k}'; \omega_n).$$

(d) 用类似于方程 (23.15) 和(23.22)的形式表示内能和热力学势.

7.5 应用习题 7.4 的理论于均匀磁场中的自旋为 1/2 的费米子系统，磁场中的 $V_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = -\mu_0\mathscr{H}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}$.

(a) 用 G^{ex} (对于 $T=0$) 和 $\mathscr{G}^{ex}$ (对于 $T\geqslant 0$) 表示磁化强度 $\mathbf{M}$ (单位体积的磁矩).

(b) 在每一情况下求解 Dyson 方程并求出 $\mathbf{M}$；从而得出 $T\to 0$ 的下述极限 $\chi_p = 3\mu_0^2 n/2\varepsilon_F$ (Pauli 顺磁性)和 $T\to\infty$ 的 $\chi_C = \mu_0^2 n/k_B T$ (居里定律)，这里 n 是粒子密度.

(c) 为什么零温度理论给出错误的答案?

7.6 试证

$$\frac{1}{2\pi i}\int_C f(z)\tanh z dz = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\frac{2n+1}{2}i\pi\right),$$

$$\frac{1}{2\pi i}\int_C f(z)\coth z dz = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\frac{2n}{2}i\pi\right),$$

这里 C 是图 25.4 所示的迴路. 并清楚地叙述关于 $f(z)$ 的解析结构的各个假定.

7.7 用方程 (26.10) 和 (26.11) 对玻色子和费米子两者计算 E 和 Ω 的第一级改正.

第八章　有限温度下的物理系统

27. Hartree-Fock 近 似

如在第 10 节中所讨论的，有许多这样的物理系统，可以在其中讨论单个粒子在所有别的粒子产生的平均自洽场中的运动. 这些自洽近似中最简单的示于图 27.1 (比较图 10.3)，其中粗线表示 $\mathcal{G}$ 自身而不只是 $\mathcal{G}^0$. 这个近似自能给出 Hartree-Fock 方程在有限温度下的推广，它对玻色子和费米子两者都是成立的.

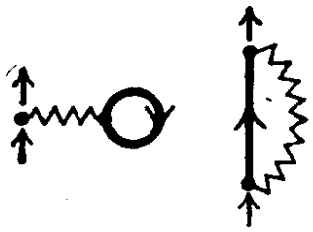


图 27.1　有限温度下的正规自能的自洽 Hartree-Fock 近似.

我们再次考虑静态的且与自旋无关的外势 $U(\mathbf{x})$ 中的系统. 于是，巨正则哈密顿函数由下式给出 [比较方程 (10.1 a) 和 (10.1 b)]

$$\hat{K}_0 = \int d^3x\, \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x}) - \mu\right]\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \quad (27.1)$$

$$\hat{K}_1 = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x'\, \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\,\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\times\, \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \quad (27.2)$$

这里再次假设，相互作用势与自旋无关. 在现在的近似中，Dyson 方程取图 27.2 所示的形式，它在形式上与零温度的(图

10.5) 相同. 既然 $\hat{K}$ 不含时间，就可以引进相对于 τ 变量的 Fourier 级数:

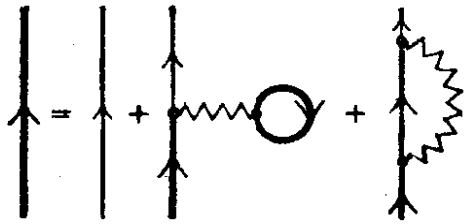


图 27.2 在 Hartree-Fock 近似下的 $\mathcal{G}$ 的 Dyson 方程.

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n), \quad (27.3)$$

$$\Sigma^\star(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\Sigma^\star(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n). \quad (27.4)$$

对应于图 27.1 和图 27.2 的解析表示式容易求得为[比较方程 (10.6) 和 (10.7)]

$$\begin{aligned}
&\hbar\Sigma^\star(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1', \omega_n) \\
&\quad \equiv \hbar\Sigma^\star(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1') \\
&\quad = \mp(2s+1)\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1') \\
&\qquad \times \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)(\beta\hbar)^{-1} \\
&\qquad \times \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta}\mathcal{G}(\mathbf{x}_2, x_2, \omega_{n'}) - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')(\beta\hbar)^{-1} \\
&\qquad \times \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta}\mathcal{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1', \omega_{n'}),
\end{aligned} \quad (27.5)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega_n) = \mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega_n) + \int d^3x_1 d^3x_1' \mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \omega_n) \\
\times \Sigma^\star(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1')\mathcal{G}(\mathbf{x}_1', \mathbf{y}, \omega_n),
\end{aligned} \quad (27.6)$$

式中的自能 $\Sigma^\star(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1')$ 与频率 ω_n 无关.

未微扰的温度 Green 函数 $\mathcal{G}^0$ 可用 H_0 的正交归一本征函数[方程(10.8)]展开，我们求得[比较方程(10.10)和(25.17)]

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = \sum_j \frac{\varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j(\mathbf{x}')^*}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\varepsilon_j^0 - \mu)}. \quad (27.7)$$

按类似的方式，相互作用温度 Green 函数 $\mathcal{G}$ 假定为有展开式

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = \sum_j \frac{\varphi_j(\mathbf{x})\varphi_j(\mathbf{x}')^*}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)}, \tag{27.8}$$

这里 $\{\varphi_j\}$ 表示能量为 ϵ_j 的单粒子波函数正交归一完全集合。用方程 (23.8) 和 (25.38) 可算出平均粒子数密度

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle &= \mp(2s+1)(\beta\hbar)^{-1}\sum_n e^{i\omega_n\eta}\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}, \omega_n) \\ &= (2s+1)\sum_j |\varphi_j(\mathbf{x})|^2 n_j,\end{aligned} \tag{27.9}$$

其中

$$n_j = (e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} \mp 1)^{-1} \tag{27.10}$$

是第 j 个态的平衡分布函数. 相应地，平均粒子数由下式给出，

$$N(T, V, \mu) = (2s+1)\sum_j n_j, \tag{27.11}$$

如果认为 N 是固定的，此式（原则上）可反过来解出 $\mu(T, V, N)$. 现在可以立即算出方程 (27.5) 中的频率求和，其结果

$$\begin{aligned}\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1') &= (2s+1)\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')\int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \\ &\quad \times \sum_j |\varphi_j(\mathbf{x}_2)|^2 n_j \pm V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1') \\ &\quad \times \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}_1)\varphi_j(\mathbf{x}_1')^* n_j \\ &= \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')\int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\langle \hat{n}(\mathbf{x}_2) \rangle \\ &\quad \pm V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')\sum_j \varphi_j(\mathbf{x}_1)\varphi_j(\mathbf{x}_1')^* n_j.\end{aligned} \tag{27.12}$$

方程 (27.6) 和方程 (27.12) 的结合给出用 φ_j^0 表示 φ_j 的非线性方程.

为方便，引入微分算符

$$\mathscr{L}_1 = i\hbar\omega_n + \frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} + \mu - U(\mathbf{x}_1) = i\hbar\omega_n - K_0,$$

它是 $\hbar^{-1}\mathscr{G}^0$ 的逆算符. 接着进行的分析与第 10 节的完全一样,我们只叙述 φ_j 的最后方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} + U(\mathbf{x}_1)\right]\varphi_j(\mathbf{x}_1) + \int d^3x_1'\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_1')\varphi_j(\mathbf{x}_1') = \epsilon_j\varphi_j(\mathbf{x}_1), \tag{27.13}$$

这里 $\hbar\Sigma^*$ 现在显含 T 和 μ. 这个自洽方程组是 Hartree-Fock 理论向有限温度的推广;温度直接影响分布函数 n_j,也通过自洽势修改了 ϵ_j 和 φ_j. 虽然对玻色子说来,当温度在凝聚温度以下时,理论丧失其物理内容,但对于费米子,则是在一切温度都保持为正确的. 特别是,在 $T = 0$, Fermi-Dirac 函数归结为阶跃函数 $\theta(\mu - \epsilon_j)$, 因而能量低于 μ 的一切态均被填满. 如所预期,费米子的这个 Hartree-Fock 理论用被占据的态数来决定 $T = 0$ 时的总粒子数[方程 (27.11)].

在 Hartree-Fock 近似下,内能可从方程 (23.15) 推广而得出,

$$\begin{aligned} E(T,V,\mu) = {} & \mp(2s+1)\int d^3x \lim_{\mathbf{x}'\to\mathbf{x}}(\beta\hbar)^{-1}\sum_n e^{i\omega_n\eta} \\ & \times \frac{1}{2}\left[i\hbar\omega_n - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x}) + \mu\right] \\ & \times \mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) \\ = {} & (2s+1)\sum_j \epsilon_j n_j - \frac{1}{2}(2s+1)\int d^3x d^3x' \\ & \times \sum_j \varphi_j(\mathbf{x})^*\hbar\Sigma^*(\mathbf{x},\mathbf{x}')\varphi_j(\mathbf{x}')n_j, \end{aligned} \tag{27.14}$$

这最后的形式是用了方程 (27.13), (25.38) 和 (26.9) 而得到的. 这个表示式可解释为方程 (27.13) 所定出的自洽单粒子能量 σ_j 的系综平均, 而第二项消除重复计数的效应 [见方程

(10.18)后面的讨论]. 方程 (27.12) 和方程 (27.14) 相结合，就给出

$$E(T,V,\mu)=(2s+1)\sum_j \epsilon_j n_j-\frac{1}{2}(2s+1)$$
$$\times\sum_{jk} n_j n_k\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$
$$\times[(2s+1)|\varphi_j(\mathbf{x})|^2|\varphi_k(\mathbf{x}')|^2$$
$$\pm\varphi_j(\mathbf{x})^*\varphi_k(\mathbf{x})\varphi_k(\mathbf{x}')^*\varphi_j(\mathbf{x}')],\qquad(27.15)$$

它(对于费米子)在零温度化为通常的 Hartree-Fock 表示式，只是用对 μ 的关系代替了对 N 的关系.

现在可就均匀系统考虑这些方程的形式，这时 $U(\mathbf{x})=0$ 而 $\Sigma^*(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\Sigma^*(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$. 于是自洽条件变得简单得多了，因为 $\varphi_j(\mathbf{x})$ 可以取作平面波 $V^{-\frac{1}{2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$，只有 ϵ_k 尚待确定. 直接代入表明，$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ 的确是方程 (27.13) 的解；此外，自洽的单粒子能量成为

$$\epsilon_k=\epsilon_k^0+\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}),\qquad(27.16)$$

其中 $\Sigma^*(\mathbf{k})$ 是 $\Sigma^*(\mathbf{x})$ 的 Fourier 变换，并由下式给出，

$$\hbar\Sigma^*(\mathbf{k})=(2s+1)V(0)(2\pi)^{-3}\int d^3k' n_{k'}\pm(2\pi)^{-3}$$
$$\times\int d^3k' n_{k'}V(\mathbf{k}-\mathbf{k}').\qquad(27.17)$$

自洽条件归结为

$$n_k=\frac{1}{e^{(\epsilon_k-\mu)/k_BT}\mp 1},\qquad(27.18)$$

在上式中，ϵ_k 既决定 n_k，又被 n_k 所决定. 注意 n_k 和 ϵ_k 两者都依赖于 μ，而 μ 可由条件

$$N(T,V,\mu)=(2s+1)V(2\pi)^{-3}\int d^3k n_k\qquad(27.19)$$

决定. 最后，内能成为

$$E = (2s+1)V(2\pi)^{-3}\int d^3k\left[\epsilon_k - \frac{1}{2}\hbar\Sigma^*(\mathbf{k})\right]n_k$$

$$= (2s+1)V(2\pi)^{-3}\int d^3k\left[\epsilon_k^0 + \frac{1}{2}\hbar\Sigma^*(\mathbf{k})\right]n_k. \quad (27.20)$$

我们强调指出，在这些表示式中的 ϵ_k，n_k 和 $\Sigma^*(\mathbf{k})$ 全都通过方程 (27.18) 而依赖于 T 和 μ.

28. 温度靠近 T_c 的非理想 Bose 气体

作为自洽的 Hartree-Fock 近似的一个例子，我们考虑自旋为零的非理想 Bose 气体，其温度接近凝聚温度. 先回忆理想气体中的情况是有帮助的，那里只有两个特征能量：热能 k_BT 和零点能 $\hbar^2n^{\frac{2}{3}}/m$，零点能是因为系统定域在体积 n^{-1} 中而引起的. 理想 Bose 气体的凝聚温度 T_0 由条件 $k_BT_0 \approx \hbar^2n^{\frac{2}{3}}/m$ [见方程(5.30)] 决定，这从量纲来考虑是显然的. 可是，相互作用的引入使问题显著地复杂化，因为势 $V(\mathbf{x})$ 既有一定强度又有一定力程 a. 如下面所表明，只有当

$$k_BT_C \approx k_BT_0 \approx \frac{\hbar^2n^{\frac{2}{3}}}{m} \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad (28.1)$$

$$nV(0) \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad (28.2)$$

这里的计算才是正确的，式中 $V(0) \equiv V(\mathbf{k}=0)$. 第一个条件表明这是低密度近似 ($na^3 \ll 1$)，而第二个条件限制了势的强度. 但是，注意我们并不需要通常的 Born 近似的条件 [$V(0) \ll \hbar^2a/m$]，Born 近似的条件较为苛刻，两者相差因子 $na^3 \ll 1$.

平均粒子密度和自洽激发谱，由下列两式给出

$$n(T, V, \mu) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{e^{(\epsilon_k-\mu)/k_BT}-1}, \quad (28.3)$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{V(0) + V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{e^{(\varepsilon_{k'}-\mu)/k_BT} - 1}. \tag{28.4}$$

方程 (28.3) 规定密度作为 T 和 μ 的函数，但是令 n 固定，反过来解出 $\mu(T, V, N)$ 较为方便. 在这种情况下，化学势在高温下是很大的而且为负[见方程 (5.26)]，但随着 T 的降低，它向正值方向增加. 完全像理想 Bose 气体那样，凝聚开始出现的温度 T_c 由下述条件决定：在 $k = 0$，$\varepsilon_k - \mu = 0$，此时粒子中的有限一部分开始占据最低能量态 ε_0 [见方程 (5.30) 后面的讨论]. 然而，这里的计算比较复杂，因为 ε_k 和 μ 两者都依赖于 T.

假设 $V(\mathbf{x})$ 具有 Fourier 变换，

$$V(\mathbf{k}) = \int d^3x V(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \tag{28.5}$$

由于它的力程有限，可以展开如下

$$V(\mathbf{k}) = \int d^3x V(\mathbf{x}) \left[1 - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})^2 + \cdots\right]. \tag{28.6}$$

对于球对称势，线性项为零. 如果定义均方半径 a^2 为

$$a^2 = \frac{\int d^3x V(\mathbf{x}) x^2}{\int d^3x V(\mathbf{x})}, \tag{28.7}$$

则方程 (28.6) 可写成

$$V(\mathbf{k}) = V(0)\left[1 - \frac{1}{6}(ka)^2 + \cdots\right], \tag{28.8}$$

只要 $V(\mathbf{x})$ 是处处排斥的，则 $V(0)$ 和 a^2 两者都是正的. 能谱也可按 k^2 的幂展开：

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \cdots, \tag{28.9}$$

从方程 (28.3) 和 (28.4) 得到上式中的

$$\varepsilon_0 = 2nV(0) - \frac{1}{6}V(0)a^2\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{k'^2}{e^{(\varepsilon_{k'}-\mu)/k_BT}-1}$$

$$= 2nV(0)\left[1+O\left(\frac{ma^2k_BT}{\hbar^2}\right)\right], \tag{28.10}$$

和

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m}\left[1 - \frac{nV(0)ma^2}{3\hbar^2}\right]. \tag{28.11}$$

这两个表示式中的第二项，由于条件 (28.1) 和 (28.2)，分别表示小的改正. 既然有效质量完全来自方程(28.4)中的交换作用，它显然是一种量子力学效应.

转变温度和相应的化学势由下列一对方程定出，

$$n = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\exp(\hbar^2k^2/2m^*k_BT_c)-1}, \tag{28.12}$$

$$\mu(T_c) = \varepsilon_0. \tag{28.13}$$

方程 (28.12) 等同于质量为 m^* 的理想气体的方程，我们求得[见方程 (5.30)]

$$k_BT_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m^*}\left[\frac{n}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\right]^{\frac{2}{3}}. \tag{28.14}$$

如果 T_0 表示具有同样密度和质量 m 的无相互作用气体的转变温度，则粒子间势使转变温度移动 ΔT_c[1]，

$$\frac{\Delta T_c}{T_0} = \frac{T_c - T_0}{T_0} = \frac{m}{m^*} - 1$$

$$= -\frac{1}{3}\frac{ma^2nV(0)}{\hbar^2}. \tag{28.15}$$

注意纯排斥势使转变温度降低. 对于 $V(\mathbf{x})$ 的任一特定选

---

1) 这个结果由 M. Luban 得到，*Phys. Rev.* **128**: 965(1962)，也由 V. K. Wong 得到，Ph. D Thesis, University of California, Berkeley(1966)(未发表).

择，常数 a^2 和 $V(0)$ 容易算出；特定地说，对于点势 $V(\mathbf{x}) = V_0\delta(\mathbf{x})$，$\Delta T_c = 0$.

29. 低温下非理想 Fermi 气体的比热

对于费米子，Hartree-Fock 近似也是有用的模型；作为一个特定而非平凡的例子，我们将在低温极限下算出熵和比热[1]. 一个可能的途径是，从方程 (26.11) 计算热力学势 $\Omega(T, V, \mu)$，但是用方程(25.25) 和 (25.26)来作较为容易：

$$K = E - \mu N = \frac{1}{2} V(2\pi)^{-3}(\beta\hbar)^{-1} \times \int d^3k \sum_n e^{i\omega_n\eta}[i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu]\mathrm{tr}\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n). \quad (29.1)$$

基本的关系式是恒等式 $K = \Omega + TS$ [方程 (4.7)]，因此

$$\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_{V\mu} = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V\mu} + S + T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V\mu}. \quad (29.2)$$

右边头两项抵消 [方程 (4.9)]，剩下

$$\left(\frac{\partial K}{\partial T}\right)_{V\mu} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V\mu}. \quad (29.3)$$

这个表示式与通常的比热不同，因为 μ 保持固定，但它使得我们可以在恒定 V 和 μ 下用积分算出熵.

$\mathcal{G}$ 的低温展开式

方程 (29.1) 完全是一般的，如果只研究首要的有限温度

---

1) 这里用的一些技巧是由 A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinskii 引入的，"Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics" sec 19. (中译本"统计物理学中的量子场论方法" §19，郝柏林译 1963，科学出版社) 但是在几个重要方面，我们的计算与他们不同.

改正，这里的计算可以简化得多．准确的 Green 函数 $\mathcal{G}$ 通过分立的频率 $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta\hbar$ 和自能 $\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T)$ 两者而依赖于 T［见例如方程 (27.17)］．这个函数依赖关系可以写成显式，只要把 Dyson 方程写成

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T) = \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) + \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) \times \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T)\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T), \tag{29.4}$$

其中 $\mathcal{G}^0$ 只通过 ω_n 依赖于 T，矩阵指标略去未写．反函数 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T)^{-1}$ 和 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0)^{-1}$ 满足方程

$$\begin{cases} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T)^{-1} = \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n)^{-1} - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T), \\ \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0)^{-1} = \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n)^{-1} - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0), \end{cases} \tag{29.5}$$

它们之差给出

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T)^{-1} - \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0)^{-1} = -\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) + \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0). \tag{29.6}$$

左乘以 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0)$，再右乘以 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T)$，得出

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T) = \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0) + \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0) \times [\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0)] \times \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T). \tag{29.7}$$

这里随着 $T \to 0$，末项为零，因此，这个准确的方程在低温下可近似为

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, T) \approx \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0) + \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0) \times [\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0)] \times \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n, 0). \tag{29.8}$$

Hartree-Fock 近似

在推导方程 (29.8) 中所用的唯一假设是温度很低．但是，以下的分析则不那么一般，因为现在我们将限于 Hartree-Fock 模型，在这模型中，Σ^* 与频率无关，它是从图 27.1 中的图解定出的．假设自旋为 1/2 的费米子，且相互作用与自旋

无关，从 Feynman 规则有

$$\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{k},T)=(\beta\hbar)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^{3}q\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}\times[2V(0)-V(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\mathcal{G}(\mathbf{q},\omega_{n'},T),\tag{29.9}$$

其中已令 $\mathcal{G}_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}\mathcal{G}$. 方程 (29.8) 可用来改写这个式子为

$$\begin{aligned}\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{k},T)=(\beta\hbar)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^{3}q\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}&\times[2V(0)-V(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\{\mathcal{G}(\mathbf{q},\omega_{n'},0)\\&+[\mathcal{G}(\mathbf{q},\omega_{n'},0)]^{2}\\&\times[\Sigma^{*}(\mathbf{q},T)-\Sigma^{*}(\mathbf{q},0)]\}.\end{aligned}\tag{29.10}$$

这里随着 $T\to 0$，曲括号里的第二项显然成为可忽略的，这使我们想到或者可能把对 $\omega_{n'}$ 的分立求和更换为积分 [见方程 (25.15)]:

$$(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n'}\to(2\pi)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_{n'}.\tag{29.11}$$

只有和与积分两者收敛于同一极限时，这样的步骤才是允许的. 但是，在这里的情况下，所得到的积分太奇异了以至不允许这个更换[1].

为了说明这个相当微妙的差别，我们将直接算出这个和，然后与近似的积分比较. 考虑方程 (29.10) 中出现的量:

$$\begin{aligned}&(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}[\mathcal{G}(\mathbf{q},\omega_{n'},0)]^{2}\\&=(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}[i\omega_{n'}-\hbar^{-1}(\varepsilon_{q}-\mu)]^{-2}\\&=\hbar\frac{\partial}{\partial\varepsilon_{q}}\left\{(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}[i\omega_{n'}-\hbar^{-1}(\varepsilon_{q}-\mu)]^{-1}\right\}\\&=\hbar\frac{\partial n_{q}(T)}{\partial\varepsilon_{q}},\end{aligned}\tag{29.12}$$

1) J. M. Luttinger and J. C. Ward 首先着重指出这一点，*Phys., Rev* **118**: 1417(1960).

这里我们引入了零温度下的激发谱，

$$\varepsilon_q = \varepsilon_q^0 + \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0), \tag{29.13}$$

而

$$n_q(T) = (e^{\beta(\varepsilon_q-\mu)} + 1)^{-1} \tag{29.14}$$

只是因为式中出现 β 而依赖于 T. 方程 (29.12) 在 $T = 0$ 时并不为零；而是化为 $-\hbar\delta(\mu - \varepsilon_q)$. 现在来看相应的零温度积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega\eta}}{[i\omega - \hbar^{-1}(\varepsilon_q - \mu)]^2}. \tag{29.15}$$

它具有留数为 $-i\eta e^{\eta\hbar^{-1}(\varepsilon_q-\mu)}$ 的二阶极点 $\omega = i\hbar^{-1}(\mu - \varepsilon_q)$，显然使积分随着 $\eta \to 0$ 而变为零. 更仔细的检查表明积分在 $\varepsilon_q = \mu$ 发散. 因此需要用极限过程来规定它在那一点的值，而方程(29.12)所考察的有限温度理论的分立求和，正好可用于这个目的[1].

现在可以求得低温下自能的显式

$$\begin{aligned}\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) = (2\pi)^{-3}\int d^3q[2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})]n_q(T) \\ + (2\pi)^{-3}\int d^3q \times [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \\ \times [\hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0)]\frac{\partial n_q(0)}{\partial \varepsilon_q},\end{aligned} \tag{29.16}$$

这里在第二(改正)项中用 $n_q(0)$ 替换 $n_q(T)$ 是允许的. 在零温度，因为 $n_q(0) = \theta(\mu - \varepsilon_q)$，方程 (29.16) 就成为熟知的形式[比较方程 (27.17)]

$$\begin{aligned}\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0) = (2\pi)^{-3}\int d^3q[2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \\ \times \theta(\mu - \varepsilon_q).\end{aligned} \tag{29.17}$$

---

1) 注意，零温度理论的相应实频率积分的分母中的绝热阻尼项 $\pm i\eta$ 起着完全同样的作用。

在这个只保留首要低温改正的近似中，方程(29.16)和(29.17)在一起给出

$$\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{k},T)-\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{k},0)$$
$$=(2\pi)^{-3}\int d^{3}q[2V(0)-V(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\{n_{q}(T)-n_{q}(0)$$
$$+\frac{\partial n_{q}(0)}{\partial\varepsilon_{q}}[\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{q},T)-\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{q},0)]\},\qquad(29.18)$$

这可以认为是 $\Sigma^{*}(\mathbf{q},T)-\Sigma^{*}(\mathbf{q},0)$ 的积分方程.

现在可以联立方程 (29.1) 和 (29.8)，而将基本的热力学函数 $K(T,V,\mu)$ 写为

$$K(T,V,\mu)=V(2\pi)^{-3}\int d^{3}k(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n}e^{i\omega_{n}\eta}$$
$$\times(i\hbar\omega_{n}+\varepsilon_{k}^{0}-\mu)\mathcal{G}(\mathbf{k},\omega_{n},0)$$
$$+V(2\pi)^{-3}\int d^{3}k(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n}e^{i\omega_{n}\eta}$$
$$\times(i\hbar\omega_{n}+\varepsilon_{k}^{0}-\mu)[\mathcal{G}[\mathbf{k},\omega_{n},0)]^{2}$$
$$\times[\Sigma^{*}(\mathbf{k},T)-\Sigma^{*}(\mathbf{k},0)].\qquad(29.19)$$

用方程 (25.38)、(26.9) 和方程 (29·13) 容易算出上式中的第一项的求和：

$$(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n}e^{i\omega_{n}\eta}(i\hbar\omega_{n}+\varepsilon_{k}^{0}-\mu)$$
$$\times[i\omega_{n}-\hbar^{-1}(\varepsilon_{k}^{0}-\mu)-\Sigma^{*}(\mathbf{k},0)]^{-1}$$
$$=[2(\varepsilon_{k}-\mu)-\hbar\Sigma^{*}[\mathbf{k},0)]n_{k}(T)\ .\qquad(29.20)$$

当 $T\to 0$ 时，方程 (29.19) 的第二项形式上趋于零，但这求和又是太奇异了，以致不能用积分代替；直接计算给出

$$(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n}e^{i\omega_{n}\eta}(i\hbar\omega_{n}+\varepsilon_{k}^{0}-\mu)[\mathcal{G}(\mathbf{k},\omega_{n},0)]^{2}$$
$$=\hbar n_{k}(T)+[2(\varepsilon_{k}-\mu)-\hbar\Sigma^{*}(\mathbf{k},0)]\hbar\frac{\partial n_{k}(T)}{\partial\varepsilon_{k}},\qquad(29.21)$$

现在可以取极限 $T \to 0$. 方程 (29.19) 到方程 (29.21) 的结合给出

$$
\begin{aligned}
&K(T, V, \mu) - K(0, V, \mu) \\
&\quad = V(2\pi)^{-3}\int d^3k 2(\varepsilon_k - \mu)[n_k(T) - n_k(0)] \\
&\quad + V(2\pi)^{-3}\int d^3k 2(\varepsilon_k - \mu)\frac{\partial n_k(0)}{\partial \varepsilon_k} \\
&\quad \times [\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] \\
&\quad + V(2\pi)^{-3}\int d^3k n_k(0)[\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] \\
&\quad - V(2\pi)^{-3}\int d^3k \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)\Big\{n_k(T) - n_k(0) \\
&\quad + \frac{\partial n_k(0)}{\partial \varepsilon_k}[\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)]\Big\}. \qquad (29.22)
\end{aligned}
$$

第二项为零，这是由于与 δ 函数 $\partial n_k(0)/\partial \varepsilon_k = -\delta(\varepsilon_k - \mu)$ 相乘的因子为 $\varepsilon_k - \mu$. 这个抵消之所以发生是因为所有的量已经用准确的谱 ε_k 表出，这表明必须保持 Hartree-Fock 理论的完全的自洽性. 另外，方程 (29.22) 的最后两项也抵消，这只要把方程 (29.18) 代入方程 (29.22) 的第三项，然后利用方程 (29.17) 就能看出来. 于是，方程 (29.22) 化为极其简单的结果

$$
\begin{aligned}
&K(T, V, \mu) - K(0, V, \mu) \\
&\quad = V(2\pi)^{-3}\int d^3k 2(\varepsilon_k - \mu)[n_k(T) - n_k(0)], \qquad (29.23)
\end{aligned}
$$

这是我们的最终形式. 这个结果指明，对 $\langle \hat{H} - \mu\hat{N}\rangle_0$ 的仅有的低温改正，来自粒子在零温度各能级 ε_k 间的统计再分布，这些 ε_k 由基态中的相互作用所决定.

熵的计算

现在可从热力学恒等式 [方程 (29.3)] 算出熵，

$$T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V\mu} = V\frac{\partial}{\partial T}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}2(\varepsilon_k-\mu)n_k(T)$$

$$= V\frac{\partial}{\partial T}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}(\varepsilon_k-\mu)\left(1-\tanh\frac{\varepsilon_k-\mu}{2k_BT}\right)$$

$$= \frac{V}{2k_BT^2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}(\varepsilon_k-\mu)^2\mathrm{sech}^2\frac{\varepsilon_k-\mu}{2k_BT}, \quad (29.24)$$

这是 (T, V, μ) 的显函数. 对角度的积分容易完成:

$$T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V\mu} = \frac{V}{4\pi^2k_BT^2}\int_0^\infty k^2dk(\varepsilon_k-\mu)^2\mathrm{sech}^2\frac{\varepsilon_k-\mu}{2k_BT}, \quad (29.25)$$

只剩下一个对 k 的积分. 在低温下,被积函数在点 $\varepsilon_k=\mu$ 有峰值,其宽度随 $T\to 0$ 而趋于零. 如果把变量变换到 $\xi\equiv(1/2k_BT)(\varepsilon_k-\mu)$,下限可延伸到 $\xi=-\infty$ 而其误差可忽略:

$$T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V\mu} = Vk_B^2T\left[k^2\frac{dk}{d\varepsilon_k}\right]_{\varepsilon_k=\mu}\frac{2}{\pi^2}\int_{-\infty}^\infty d\xi\xi^2\mathrm{sech}^2\xi$$

$$= \frac{1}{3}Vk_B^2T\left[k^2\frac{dk}{d\varepsilon_k}\right]_{\varepsilon_k=\mu}, \quad (29.26)$$

这里缓变因子 $k^2dk/d\varepsilon_k$ 已拿到积分号外. 在恒定 V 和 μ 下的积分是平凡的,我们求得

$$S(T, V, \mu) = \frac{1}{3}Vk_B^2T\left[k^2\left(\frac{d\varepsilon_k}{dk}\right)^{-1}\right]_{\varepsilon_k=\mu}. \quad (29.27)$$

熵是系统的态的热力学函数,现在可以变换变量,从固定 μ 换到固定 N. 为了得到首要一级的低温改正,可用零温度方程

$$N = 2V(2\pi)^{-3}\int d^3k\theta(\mu-\varepsilon_k)$$

$$= 2V(2\pi)^{-3}\int d^3k\theta(k_F-k) = Vk_F^3(3\pi^2)^{-1}, \quad (29.28)$$

其中 Fermi 能现在由下面的关系式定义 [见方程 (29.13) 和 (29.17)],

$$\mu = \varepsilon_{k_F} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \hbar\Sigma^*(k_F, 0)$$

$$= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \left\{(2\pi)^{-3}\int d^3q[2V(0) - V(\mathbf{k}-\mathbf{q})]\right.$$

$$\left.\times\,\theta(k_F - q)\right\}\Big|_{k=k_F}. \tag{29.29}$$

在 Fermi 面的导数 $(d\varepsilon/dk)|_{k_F}$ 定义了有效质量

$$\left.\frac{d\varepsilon_k}{dk}\right|_{k_F} = \frac{\hbar^2 k_F}{m^*}, \tag{29.30}$$

而低温熵和热容量成为

$$S(T, V, N) = C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{VN}$$

$$= Nk_B^2 T\frac{2m^*}{\hbar^2 k_F^2}\frac{\pi^2}{2}. \tag{29.31}$$

这些表示式除了出现有效质量 m^*以外，在形式上等同于理想 Fermi 气体的表示式[见方程 (5.58) 和 (5.59)]. 简单的计算给出

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{1}{\hbar k_F}\left.\frac{\partial\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)}{\partial k}\right|_{kF}. \tag{29.32}$$

值得注意的是，低温热力学函数单纯由零温度激发谱决定. 这个简单结果事实上是非常一般的[1]，但在这里它是来自 Hartree-Fock 自能的特殊形式. 因为 $\Sigma^*(\mathbf{k}, T)$ 与频率无关，因此，谱 ε_k 只是把各个单粒子能级的能量移动一下，相互作用基态仍旧是由填满的 Fermi 海所组成. 低温热容量取决于 Fermi 能 $\varepsilon_F \equiv \varepsilon_{k_F}$ 附近的能量壳层(厚度 $\approx k_B T$)中的那些粒子. 在温度为 T 时，总能量的增加 ΔE 正比于每个粒子的能量变化乘以激发粒子数，

1) J. M. Luttinger, *Phys. Rev.*, **119**: 1153 (1960)，已作出了直到微扰论一切级都成立的一般证明.

$$\Delta E \propto (k_B T) V (2\pi)^{-3} \int_s d^3k, \tag{29.33}$$

其中下标 s 表示积分区域 $|\varepsilon_k - \varepsilon_F| \lesssim k_B T$. 既然 $k_B T \ll \varepsilon_F$, 我们得到

$$\Delta E \propto (k_B T)^2 \frac{V}{(2\pi)^2} \left[k^2 \frac{dk}{d\varepsilon_k} \right]_{k_F} = (k_B T)^2 \left(\frac{3N}{2k_F^3} \frac{m^* k_F}{\hbar^2} \right), \tag{29.34}$$

这里借助于方程 (29.30) 得出 m^*, 也用到了方程 (29.28). 这样, 我们看到

$$C_V = \frac{d(\Delta E)}{dT} \propto \frac{N k_B^2 T m^*}{\hbar^2 k_F^2}, \tag{29.35}$$

而比例常数显然必定与质量为 m^* 的理想 Fermi 气体的相同.

30. 电子气体

在以上各节中, 我们研究了有限温度下的 Hartree-Fock 近似, 它适用于具有简单的两体势的系统. 例如, Fourier 变换 $V(\mathbf{q})$ 必须对一切 $\mathbf{q}$ 都有确定的意义且为有界的; 这些限制既排除了刚性核 [对 $x < a$, $V(\mathbf{x}) \to \infty$], 也排除了长程库仑尾 [当 $q \to 0$, $V(\mathbf{q}) \to \infty$]. 然而, 大多数的物理系统具有较复杂的相互作用, 必须对挑选出的某一类图解求和来处理这种相互作用, 这完全像零温度理论中一样 (第 11 和 12 节). 为确定起见, 我们研究均匀正电背景中的电子气体的热力学性质; 这个系统特别有意义, 因为最后的表达式既可描述高温经典极限又可描述零温度量子极限[1].

1) E. W. Montroll 和 J. C. Ward. *Phys. Fluids*, **1**: 55 (1958) 首先注意到这点, 他们推出本节所叙述的结果. 我们的处理在细节上有所不同, 但精神却是一致的.

近似的正规自能

哈密顿函数就是前面第 3 和 12 节研究过的，其中均匀正电背景与 $V(\mathbf{q})$ 的 $\mathbf{q}=0$ 分量抵消. 这样 $\mathcal{G}$ 的图解展开式中没有含 $\mathcal{V}_0(\mathbf{q}=0,\ \omega_n)=V(0)$ 的项. 从热力学势[见方程 (26.11)]很容易计算出平衡时的情况，

$$\Omega(T,V,\mu)=\Omega_0(T,V,\mu)+V\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}$$

$$\times\sum_n e^{i\omega_n\eta\hbar}\Sigma^{\star\lambda}(\mathbf{k},\omega_n)\mathcal{G}^{\lambda}(\mathbf{k},\omega_n),\qquad(30.1)$$

这里 $\Sigma^{\star\lambda}$ 和 $\mathcal{G}^{\lambda}$ 是与相互作用势 $\lambda V(\mathbf{x})$ 相适应的函数，而自旋求和给出附加因子 2. 我们希望按照正常的作法，用耦合常数 e^2 的幂级数算出 Ω，但是第二级项发散，就像在 $T=0$ 那样(见习题 8.4). 因此必须计入所挑选出的一类高级图解，它们的和给出有限的贡献. 通过考察微扰展开式，可以作出图解的选择，现在我们转到 $\Sigma^{\star}$ 和 $\mathcal{G}$ 的 Feynman 级数. 把相互作用在正规自能中的效应隔离出来，这将是方便的；我们将写出 $\mathcal{G}=\mathcal{G}^0+\mathcal{G}^0\Sigma^{\star}\mathcal{G}^0+\cdots$，而方程 (30.1) 的被积函数成为 $\Sigma^{\star}\mathcal{G}^0+\Sigma^{\star}\mathcal{G}^0\Sigma^{\star}\mathcal{G}^0+\cdots$.

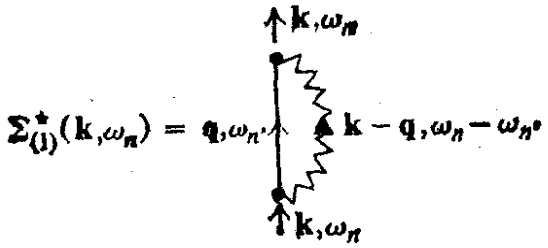


图 30.1　对电子气体正规自能的第一级贡献.

条件 $V(0)=0$ 的意思就是所有的蝌蚪图解为零. 特定地说，只存在一个第一级正规自能 (图 30.1). 这个贡献用第七章的 Feynman 规则容易算出：

$$\Sigma^{\star}_{(1)}(\mathbf{k},\omega_n)$$

$$=-\hbar^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3q(\beta\hbar)^{-1}\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}\mathscr{V}_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\omega_{n'})$$

$$\times\mathscr{G}^0(\mathbf{q},\omega_{n'})$$

$$=-\hbar^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3qV(\mathbf{k}-\mathbf{q})n_q^0, \qquad (30.2)$$

这里用到方程(25.38)算出和，而 $n_q^0=(e^{\beta(\varepsilon_q^0-\mu)}+1)^{-1}$ 是化学势 μ 的函数. 方程(30.2)不同于方程(25.39)，因为均匀正电背景抵消了直接的贡献.

热力学势的相应的第一级项由下式给出

$$\Omega_1(T,V,\mu)=V(2\pi)^{-3}\int d^3k(\beta\hbar)^{-1}\sum_n e^{i\omega_n\eta}$$

$$\times\hbar\Sigma^{\star}_{(1)}(\mathbf{k},\omega_n)\mathscr{G}^0(\mathbf{k},\omega_n), \qquad (30.3\,a)$$

$$\Omega_1(T,V,\mu)=-V(2\pi)^{-6}\int d^3kd^3qV(\mathbf{k}-\mathbf{q})n_k^0n_q^0, \qquad (30.3\,b)$$

这里已完成对 λ 的积分. 这个表示式是对基态能量第一级交换贡献[方程(3.34)]的直接推广，只是用对 μ 的显式关系代替了对 $N=Vk_F^3/3\pi^2$ 的关系，而这种代替是本节要详细讨论的. 如果用 $\Omega_0+\Omega_1$ 作为 Ω 的近似，直接的计算(见习题 8.1)预言，低温比热的行为有如 $-T[\ln T]^{-1}$，这明确地与金属中电子比热实验不一致[1]. 同样的分歧已出现在具有屏蔽势 $V(\mathbf{x})=V_0x^{-1}e^{-x/a}$ 的 Hartree-Fock 理论中，在那里随着 $a\to\infty$，有效质量 m^* 和低温比热两者都象 $[\ln(k_Fa)]^{-1}$ 那样趋于零(见习题 4.1 和 8.2).

第一级贡献所预言的行为与实际物理情况不合，因而必须考察高级项. 在 $T=0$，第二级正规自能已列举于图 9.16，同样的图解也出现于有限温度的理论中. 但是，在这里

1) J. Bardeen, *Phys. Rev.*, **50**: 1098(1936); E. P. Wohlfarth, *Phil. Mag.*, **41**: 534(1950).

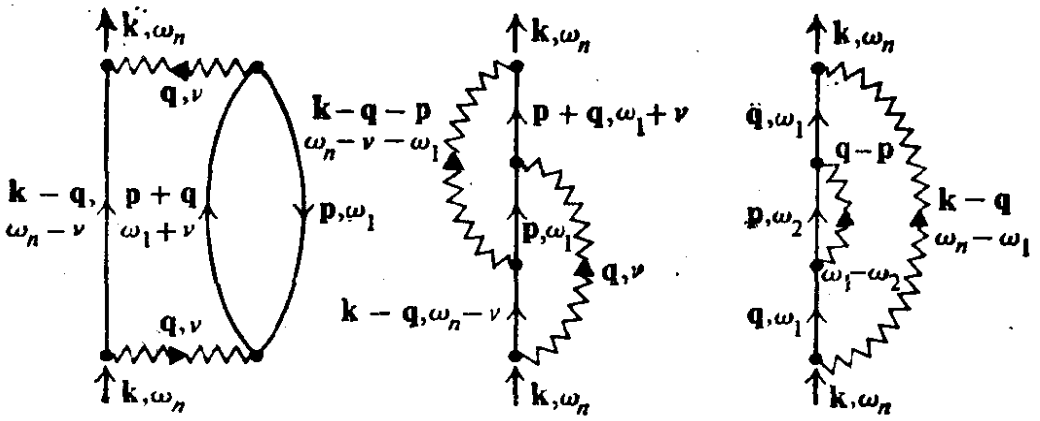


图 30.2　对电子气体的正规自能的第二级贡献.

的计算中,有三项恒为零 [$V(0)=0$], 对 $\Sigma^{\star}_{(2)}$ 仅有的第二级贡献示于图 30.2. 从这里直到本节末, 用 ν 和 ω 分别表示偶数的和奇数的频率. 相应的解析表示式是 (下标 r 表示图 30.2 a 的环形贡献)

$$\Sigma^{\star}_{(2)r}(\mathbf{k},\omega_n)=(-\hbar)^2(-2)(\beta\hbar)^{-2}\sum_{\omega,\nu}(2\pi)^{-6}\int d^3pd^3q[V(\mathbf{q})]^2$$
$$\times\mathscr{G}^0(\mathbf{p},\omega_1)\mathscr{G}^0(\mathbf{q}+\mathbf{p},\omega_1+\nu)$$
$$\times\mathscr{G}^0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\nu), \qquad (30.4\,a)$$

$$\Sigma^{\star}_{(2)b}(\mathbf{k},\omega_n)=(-\hbar)^2(\beta\hbar)^{-2}\sum_{\omega,\nu}(2\pi)^{-6}\int d^3pd^3qV(\mathbf{q})$$
$$\times V(\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p})\mathscr{G}^0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\nu)$$
$$\times\mathscr{G}^0(\mathbf{p},\omega_1)\mathscr{G}^0(\mathbf{p}+\mathbf{q},\omega_1+\nu), \qquad (30.4\,b)$$

$$\Sigma^{\star}_{(2)c}(\mathbf{k},\omega_n)=(-\hbar)^{-2}(\beta\hbar)^{-2}\sum_{\omega,\omega_2}(2\pi)^{-6}\int d^3pd^3qV(\mathbf{k}-\mathbf{q})$$
$$\times V(\mathbf{q}-\mathbf{p})\mathscr{G}^0(\mathbf{q},\omega_1)\mathscr{G}^0(\mathbf{p},\omega_2)$$
$$\times e^{i\omega_2\eta}\mathscr{G}^0(\mathbf{q},\omega_1), \qquad (30.4\,c)$$

这里 $\Sigma^{*}_{(2)r}$ 中的因子 (-2) 来自自旋求和与闭合环, 而 $\Sigma^{*}_{(2)c}$ 中的因子 $e^{i\omega_2\eta}$ 是因为瞬时相互作用线 $V(\mathbf{q}-\mathbf{p})$ 把同一粒子线 $\mathscr{G}^0(\mathbf{p},\omega_2)$ 的两端连接起来. 虽然所有三项形式上都是

e^4 数量级，但第一项在下列方式上不同于另外两项．在每一项中，频率求和给出 Fermi-Dirac 分布函数 n^0 的各种组合，但不能定性地改变对小的 $\mathbf{p}$ 和 $\mathbf{q}$ 动量积分．因此，$\Sigma^{\star}_{(2)r}$ 显然随着 $q \to 0$ 而发散 $\left[\propto e^4 \int d^3q q^{-4} \cdots \right]$，至于 $\Sigma^{\star}_{(2)b}$ 和 $\Sigma^{\star}_{(2)c}$ 则收敛．由于这个原因，任何一个只包括 $\Sigma^{\star}$ 的第一级和第二级项的计算不能认为是令人满意的，考察较高级图解是必需的．

$\Sigma^{\star}_{(2)c}$ 中的发散的根源是，在每条相互作用线上出现同样的动量传递 $\hbar q$；反之，其它图解在两条相互作用线上传递不同的动量．类似的结构延续到一切级．例如，第三级正规自能有一个（也只有一个）图解 $\Sigma^{\star}_{(3)r}$ 通过全部三条相互作用线传递同样的动量 $\hbar q$（图 30.3 a）．这项含有最强的发散第三

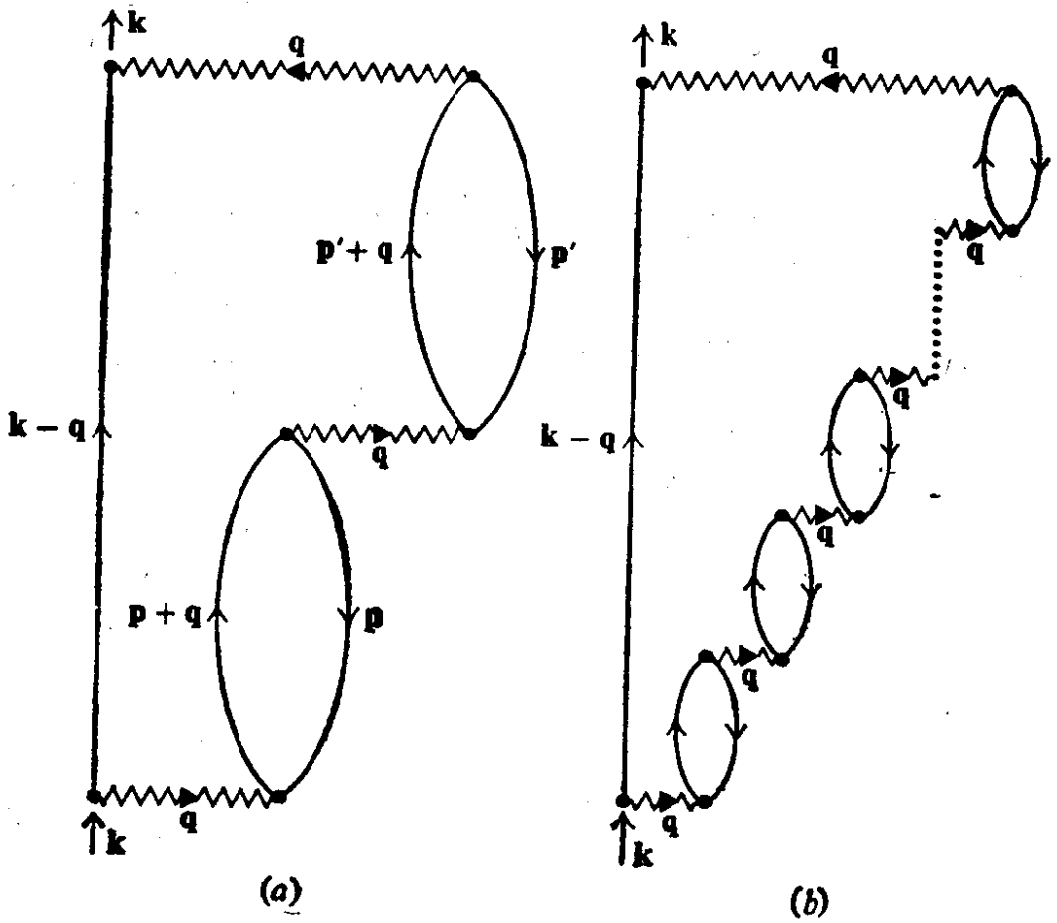


图 30.3　对正规自能的环贡献　(a) 在第三级中　(b) 在较高级中

级项 $\propto e^6\int d^3qq^{-6}$；所有其他第三级项较为不那么发散（至多是 $e^6\int d^3qq^{-4}$）. 相应地，在第 n 级中，总是有单个图解 $\Sigma^{\star}_{(n)r}\propto\int d^3q[V(q)]^n$ 比其他任一项更强地发散（相差因子 q^{-2}）(图 30.3 b). 电子气体理论的基本近似在于，将这些挑选出的发散最强的一类高级图解与全部的第一级和第二级贡献一起保留下来，

$$\Sigma^{\star}\approx\Sigma^{\star}_{(1)}+\Sigma^{\star}_{(2)b}+\Sigma^{\star}_{(2)c}+\sum_{n=2}^{\infty}\Sigma^{\star}_{(n)r}$$
$$=\Sigma^{\star}_{(1)}+\Sigma^{\star}_{(2)b}+\Sigma^{\star}_{(2)c}+\Sigma^{\star}_{r},\qquad(30.5)$$

其中 $\Sigma^{\star}_{r}$ 是具有图 30.3 b 结构（环形图解）的所有自能图解之和.

环形图解求和

我们可以很简单地作出 $\Sigma^{\star}_{r}$ 的计算，办法是，引入一个近似的有效两体相互作用 $\mathscr{V}_r$，这 $\mathscr{V}_r$ 包含了与 $\Sigma^{\star}_{r}$ 中闭合环有关的介质极化（比较第 9，12 和 26 节）. 图 30.4 表明有关的图解，相应的解析表示式是

$$\mathscr{V}_r(\mathbf{q},\nu_n)=\mathscr{V}_0(\mathbf{q},\nu_n)+\mathscr{V}_0(\mathbf{q},\nu_n)$$
$$\times\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)\mathscr{V}_0(\mathbf{q},\nu_n)+\cdots$$

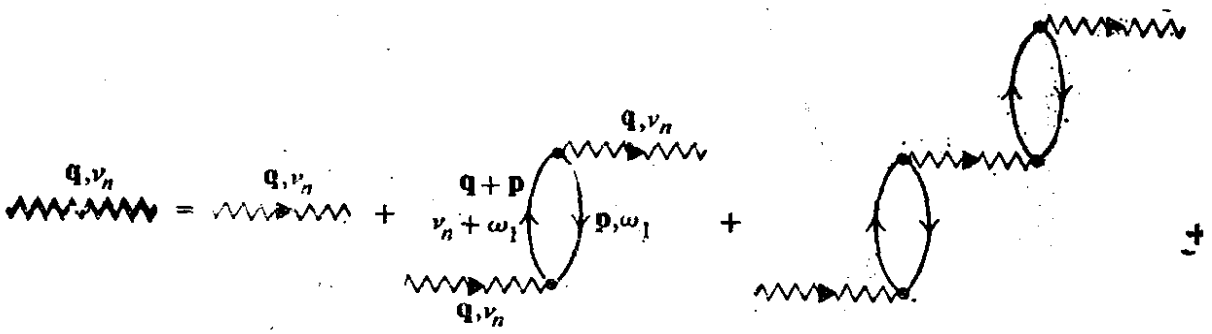


图 30.4　有效的两体相互作用的环形近似.

$$= \mathscr{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n) + \mathscr{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n) \times \Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)\mathscr{V}_r(q, \nu_n). \tag{30.6}$$

函数 $\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)$ 代表最低级的正规极化插入图形，下面将详细地算出它. 然而，在目前，只求解 Dyson 方程

$$\mathscr{V}_r(\mathbf{q}, \nu_n) = \mathscr{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n)[1 - \mathscr{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n)\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)]^{-1} = V(\mathbf{q})[1 - V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)]^{-1}, \tag{30.7}$$

就足够了. 除了 $\mathscr{V}_r(\mathbf{q}, \nu_n)$ 依赖于分立的(偶的)频率 ν_n 外，这个解在形式上等同于零温度下的解[方程 (12.22)].

$\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)$ 的解析形式容易定出，只要写出图 30.4 的前两项

$$\mathscr{V}_r(\mathbf{q}\nu_n) = \mathscr{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n) + [\mathscr{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n)]^2(-\hbar)^{-1}(\beta\hbar)^{-1}(-2) \times \sum_{\omega'} (2\pi)^{-3}\int d^3p\mathscr{G}^0(\mathbf{p}, \omega_1) \times \mathscr{G}^0(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_1 + \nu_n) + \cdots,$$

这里因子 $(-\hbar)^{-1}$ 和 (-2) 来自 e^2 的额外的幂和沿闭合费米环的自旋求和. 与方程 (30.6) 比较，我们得到

$$\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n) = 2(\beta\hbar^2)^{-1}\sum_{\omega_1} (2\pi)^{-3}\int d^3p\mathscr{G}^0(\mathbf{p}, \omega_1) \times \mathscr{G}^0(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_1 + \nu_n) = \frac{2}{\hbar}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_1}\left[\frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\varepsilon^0_{\mathbf{p}} - \mu)} \times \frac{1}{i\omega_1 + i\nu_n - \hbar^{-1}(\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \mu)}\right], \tag{30.8}$$

这非常类似于方程 (12.28). 频率求和的典型项随 $|\omega_1| \to \infty$ 具有 $|\omega_1|^{-2}$ 数量级，因而这求和是绝对收敛的. 用迴路积分可直接算出此式，但是较简单的方法是插入一个多余的收敛因子 $e^{i\omega_1\eta}$，它使得可以分解成分项分式. 于是每一项可以分别用方程 (25.38) 求和而给出

$$\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)=\frac{2}{\hbar}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{i\nu_n-\hbar^{-1}(\epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\epsilon^0_{\mathbf{p}})}\frac{1}{\beta\hbar}$$
$$\times\sum_{\omega_1}e^{i\omega_1\eta}\left[\frac{1}{i\omega_1-\hbar^{-1}(\epsilon^0_{\mathbf{p}}-\mu)}\right.$$
$$\left.-\frac{1}{i\omega_1+i\nu_n-\hbar^{-1}(\epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\mu)}\right]$$
$$=-2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-n^0_{\mathbf{p}}}{i\hbar\nu_n-(\epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{p}})},\qquad(30.9)$$

其中曾用到恒等式 $e^{i\beta\hbar\nu_n}=1$. 我们再次强调 $n^0_{\mathbf{p}}$ 依赖于参数 μ，它只有在计算的末尾才可与粒子密度 N/V 联系起来.

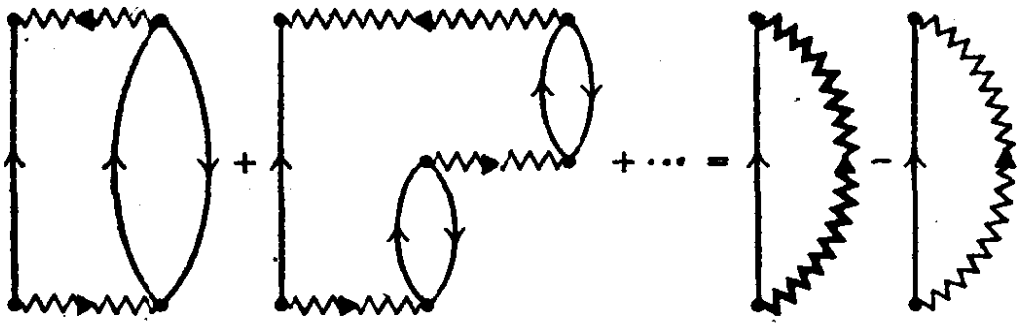


图 30.5　对正规自能的环贡献.

对正规自能的贡献 $\Sigma^{\star}_{r}(\mathbf{k},\omega_n)$ 现在可以直接用 $\mathscr{V}_r$ (图30.5) 算出，

$$\Sigma^{\star}_{r}(\mathbf{k},\omega_n)=(-\hbar)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3q(\beta\hbar)^{-1}\sum_{\nu_n}[\mathscr{V}_r(\mathbf{q},\nu_n)$$
$$-\mathscr{V}_0(\mathbf{q},\nu_n)]\mathscr{G}^0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\nu_n).\qquad(30.10)$$

方程 (30.9) 表明当 $|\nu_n|\to\infty$ 时，$\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)$ 至少象 $|\nu_n|^{-1}$ 那么快地趋于零. 结果是，差 $\mathscr{V}_r-\mathscr{V}_0$ 也是这样的，这保证了 $\Sigma^{\star}_{r}$ 里的频率求和的绝对收敛. 为表明这个收敛性，改写方程 (30.10) 中的方括号如下：

$$\mathscr{V}_r(\mathbf{q},\nu_n)-\mathscr{V}_0(\mathbf{q},\nu_n)$$
$$=\frac{V(\mathbf{q})}{1-V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)}-V(\mathbf{q})$$

$$= \frac{[V(\mathbf{q})]^2 \Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)}{1 - V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)}, \tag{30.11}$$

于是 $\Sigma_r^\star$ 成为

$$\Sigma_r^\star(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{1}{\beta\hbar^2}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sum_{\nu_n} \frac{[V(\mathbf{q})]^2 \Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)}{1 - V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_n)} \times \mathcal{G}^0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \nu_n). \tag{30.12}$$

近似的热力学势

现在有可能算出方程（30.5）中各项所引起的对热力学势的改正. 方程（30.1）的被积函数对应于加进因子 $\mathcal{G}^0$ 把 $\Sigma^\star + \Sigma^\star\mathcal{G}^0\Sigma^\star + \cdots$ 的两端连接起来，从而构成一个闭合环. 这样，$\Sigma^\star_{(1)}$、$\Sigma^\star_{(2)b}$、$\Sigma^\star_{(2)c}$ 和 $\Sigma_r^\star$ 各取一次就导致图 30.6 所

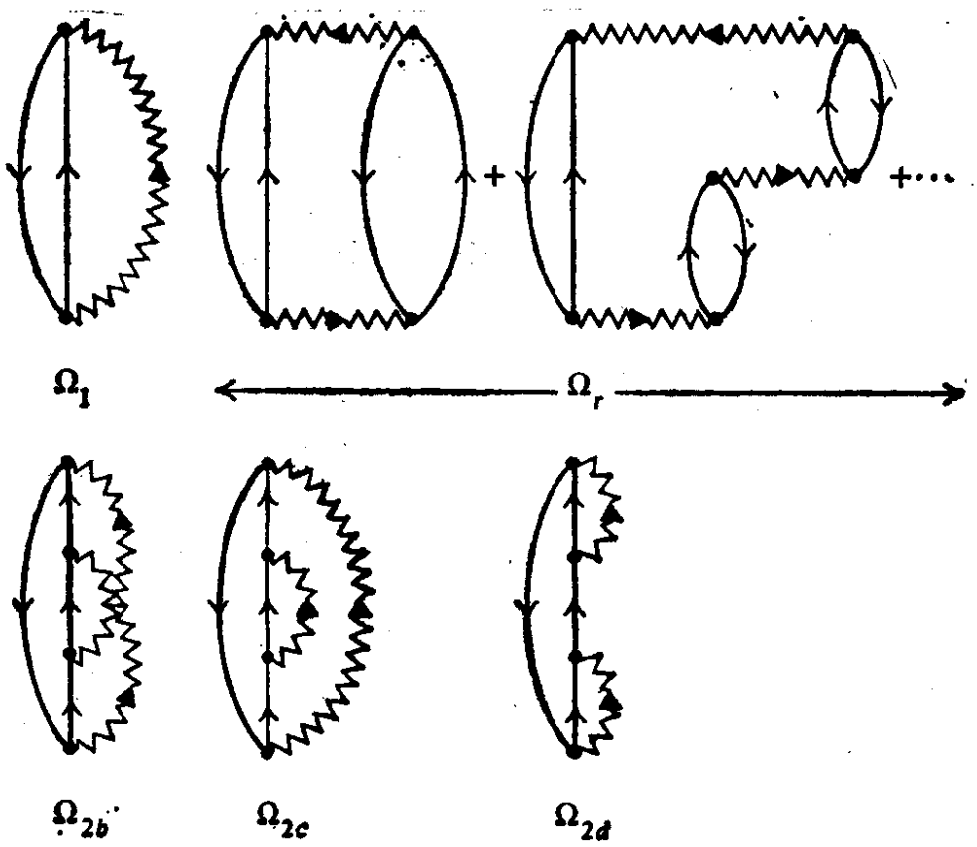


图 30.6　电子气体的热力学势中的首要项.

示的项 Ω_1、Ω_{2b}、Ω_{2c} 和 Ω_r，其中 Ω_1 已算出，在方程(30.3)中，它带有正确的收敛因子．还有由于 $\Sigma^*_{(1)}$ 的迭代而引起的附加的第二级贡献 Ω_{2d}．项 Ω_r 含有最有意义的物理效应，在下面的讨论中将详细地加以研究．其他的(显式的)第二级项可把方程(30.1)与(30.4)结合起来而写出．从图 30.6 显见 Ω_{2c} 和 Ω_{2d} 是拓扑等价的，详细的计算表明它们是相等的．直截了当的计算给出

$$\Omega_{2b}(T,V,\mu)$$

$$= V\int\frac{d^3k\,d^3p\,d^3q\,V(\mathbf{q})V(\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q})n^0_{\mathbf{k}}n^0_{\mathbf{p}}(1-n^0_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})(1-n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})}{(2\pi)^9\quad\varepsilon^0_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\varepsilon^0_{\mathbf{k}}-\varepsilon^0_{\mathbf{p}}},\tag{30.13 a}$$

$$\Omega_{2c}(T,V,\mu)=\Omega_{2d}(T,V,\mu)$$

$$=-\frac{1}{2}V\beta(2\pi)^{-9}\int d^3k\,d^3p\,d^3q\,V(\mathbf{k}-\mathbf{q})$$

$$\times V(\mathbf{p}-\mathbf{q})n^0_{\mathbf{k}}n^0_{\mathbf{p}}n^0_{\mathbf{q}}(1-n^0_{\mathbf{q}}),\tag{30.13 b}$$

对热力学势的总的贡献成为

$$\Omega=\Omega_0+\Omega_1+\Omega_r+\Omega_{2b}+2\Omega_{2c}.\tag{30.14}$$

注意，方程(30.1)中的耦合常数积分，导致对 Ω 的每一个第 n 级贡献附加一个因子 n^{-1}，它已自动地包含在基于正规自能和单粒子 Green 函数的计算程序中．作为另一条途径，有时用一组修订的 Feynman 规则从图 30.6 直接算出 Ω，但是，因为要计算到拓扑等价图解以及因子 n^{-1}，这种计算就变得十分复杂了．但是，我们的程序却只需要前面为 $\mathscr{G}$ 所发展的 Feynman 规则和图解．

上述各表示式适用于任意的两体势，只有在下列关于 Ω_r 的计算中，电子气体的特殊之处才变得明显起来，

$$\Omega_r(T,V,\mu)=V\beta^{-1}(2\pi)^3\int_0^1\lambda^{-1}d\lambda\int d^3k$$

$$\times \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta}\Sigma_r^{\star\lambda}(\mathbf{k},\omega_n)\mathscr{G}^0(\mathbf{k},\omega_n)$$

$$= -V\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}$$

$$\times \sum_{\nu_n} \frac{\lambda^2[V(\mathbf{q})]^2\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)}{1-\lambda V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)}$$

$$\times \left[\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta}\right.$$

$$\left.\times \mathscr{G}^0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\nu_n)\mathscr{G}^0(\mathbf{k},\omega_n)\right], \qquad (30.15)$$

其中 $\Sigma_r^{\star}$ 取自方程 (30.12). 对 ω_n 的求和甚至当 $\eta=0$ 也是收敛的，而与方程 (30.8) 的比较表明，方括号中的量是 $\frac{1}{2}\hbar\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)$ [在方程 (30.18) 中将证明 Π^0 是其宗量的偶函数]. 既然 $\mathscr{G}^0$ 与 λ 无关，容易完成对 λ 的积分，我们求得

$$\Omega_r = -\frac{1}{2\beta}\sum_{\nu_n}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\,\frac{\lambda^2[V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)]^2}{1-\lambda V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)}$$

$$= V(2\beta)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3q\sum_{\nu_n}\{\ln[1-V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)]$$

$$+ V(\mathbf{q})\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)\}. \qquad (30.16)$$

如果把方程 (30.16) 展开为 e^2 的幂级数，由于第一级项已消除，首要的贡献形式上是 e^4 数量级. 但是，如下面所表明，无穷级数的求和，修改了对 e^2 的这个简单的幂律依赖性，确实，随着 $e^2\to 0$，$e^{-4}\Omega_r$ 是发散的.

从方程 (30.16) 进一步研究问题，要取决于 $\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)$的显式形式，我们首先证明

$$\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n) = \Pi^0(\mathbf{q},-\nu_n). \qquad (30.17)$$

在方程 (30.9) 的分子中加上并减去 $n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}n^0_{\mathbf{p}}$，

$$\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n) = -2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,\frac{n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}(1-n^0_{\mathbf{p}})-n^0_{\mathbf{p}}(1-n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})}{i\hbar\nu_n-(\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\varepsilon^0_{\mathbf{p}})}.$$

用代换（$\mathbf{p}+\mathbf{q}\to-\mathbf{p}$）以及已假定分布函数的各向同性，可改写第一项(注意 $\varepsilon^0_{\mathbf{p}}=\varepsilon^0_{-\mathbf{p}}=\varepsilon^0_p$).

$$\begin{aligned}\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)&=-2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}n^0_{\mathbf{p}}(1-n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})\\&\quad\times\left[\frac{1}{i\hbar\nu_n-(\varepsilon^0_{\mathbf{p}}-\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})}-\frac{1}{i\hbar\nu_n-(\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\varepsilon^0_{\mathbf{p}})}\right]\\&=-4\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}n^0_p(1-n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})\frac{\varepsilon^0_{\mathbf{p}}-\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{(i\hbar\nu_n)^2-(\varepsilon^0_{\mathbf{p}}-\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})^2},\end{aligned}\tag{30.18}$$

这就证明了方程(30.17). 从上面的计算也可清楚地看出，Π^0 是 $\mathbf{q}$ 的偶函数，并且当着 $|\nu_n|\to\infty$ 它是 ν_n^{-2} 的数量级，

$$\begin{aligned}\Pi^0(\mathbf{q},\nu_n)&\underset{|\nu_n|\to\infty}{\sim}\frac{4}{(\hbar\nu_n)^2}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}n^0_{\mathbf{p}}(1-n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})\\&\quad\times(\varepsilon^0_{\mathbf{p}}-\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}).\end{aligned}\tag{30.19}$$

经典极限

现在可以将热力学势的环形图解贡献 Ω_r，用于研究两个极限情况，这里先考虑系统在高温和低密度下的行为，这时，量子力学的 Fermi-Dirac 分布可用经典的 Boltzmann 分布来近似[见方程(5.23)]，

$$n^0_p=\exp[\beta(\mu-\varepsilon^0_p)]=e^{\mu/k_BT}e^{-\hbar^2p^2/2mk_BT}(T\to\infty).\tag{30.20}$$

只要 $e^{\mu/k_BT}\ll 1$ 或等价地 $\mu/k_BT\to-\infty$，这个近似就是正确的. 在这个极限下，方程(30.19)表明，对于 $l\neq 0$，$\Pi^0(q,\nu_l)$ 按 T^{-2} 趋于零. 方程(30.16)中的频率求和分成两部分

$$\begin{aligned}\Omega_r&=\frac{1}{2}Vk_BT(2\pi)^{-3}\int d^3q\{\ln[1-V(q)\Pi^0(q,0)]\\&\quad+V(q)\Pi^0(q,0)\}\\&\quad+Vk_BT(2\pi)^{-3}\int d^3q\sum_{l=1}^{\infty}\{\ln[1-V(q)\Pi^0(q,\end{aligned}$$

$$2\pi l k_B T\hbar^{-1})] + V(q)\Pi^0(q, 2\pi l k_B T\hbar^{-1})\}, \quad (30.21)$$

分别对应于 $l = 0$ 和 $l \neq 0$，在小 q 的发散性现在已孤立在第一项中 ($l = 0$). 为了验证这个论断，我们看 $q = 0$ 附近的小区域对第二项的贡献. 在高温极限下，方程(30.19)和(30.20)给出

$$\Pi^0(q, 2\pi l k_B T\hbar^{-1}) \to 4(2\pi l k_B T)^{-2}(2\pi)^{-3}\int d^3p(\epsilon^0_{\mathbf{p}} - \epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})n^0_{\mathbf{p}}$$
$$= -2\epsilon^0_q n_0(2\pi l k_B T)^{-2} \qquad (T \to \infty),$$

其中 n_0 定义为

$$n_0 = 2(2\pi)^{-3}\int d^3p n^0_p.$$

此外，乘积

$$V(q)\Pi^0(q, 2\pi l k_B T\hbar^{-1}) \to -4\pi e^2$$
$$\times (2\pi l k_B T)^{-2}\hbar^2 n_0 m^{-1} \qquad (T \to \infty)$$

在 $q \to 0$ 时保持有界. 方程(30.21)的第二项中的对数，现在可展开为 e^2 的幂级数，被积函数成为

$$\sum_{l=1}^{\infty}\left\{\ln\left[1 - V(q)\Pi^0\left(q, \frac{2\pi l k_B T}{\hbar}\right)\right] + V(q)\Pi^0\left(q, \frac{2\pi l k_B T}{\hbar}\right)\right\}$$
$$\underset{T\to\infty}{\to} -\frac{1}{2}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{1}{l^4}\left(\frac{e}{k_B T}\right)^4\left(\frac{\hbar^2 n_0}{m\pi}\right)^2.$$

对 l 的求和收敛，在 $q \approx 0$ 时的奇异行为就这样消失了，因而方程(30.21)右边第二项对方程(30.14)中的热力学势的贡献是 e^4 的数量级，正如 $\Omega_{2b} + 2\Omega_{2c}$.

因此，对 Ω_r 的首要贡献只需要 $\Pi^0(q, 0)$，它可用原来的定义算出为

$$\Pi^0(q, 0) = 2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n^0_{\mathbf{p}}}{\epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon^0_{\mathbf{p}}}$$
$$= 2\mathscr{P}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n^0_{\mathbf{p}}}{\epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon^0_{\mathbf{p}}}. \qquad (30.22)$$

既然分子与分母在同一地点为零，我们就可以把这个积分作为 Cauchy 主值处理，从而追踪这奇异性．余下的积分是初等的，并给出

$$\begin{aligned}\Pi^0(q,0) &= 4\mathscr{P}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{n_{\mathbf{p}}^0}{\epsilon_{\mathbf{p}}^0-\epsilon_{p-q}^0}\\ &= \frac{8m}{(2\pi\hbar)^2}\mathscr{P}\int_0^\infty p^2dpn_p^0\int_{-1}^1 dz\frac{1}{2pqz-q^2}\\ &= \frac{m}{q(\pi\hbar)^2}\int_0^\infty pdpn_p^0\ln\left|\frac{2p-q}{2p+q}\right|\\ &= -2\beta e^{\beta\mu}\lambda^{-3}\varphi(q\lambda),\end{aligned}\tag{30.23}$$

其中

$$\lambda\equiv\left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{\frac{1}{2}}\tag{30.24}$$

是热波长．这里 $\varphi(x)$ 是无量纲函数

$$\varphi(x)\equiv\frac{1}{\pi x}\int_0^\infty d\xi\xi e^{-\xi^2/4\pi}\ln\left|\frac{2\xi+x}{2\xi-x}\right|,\tag{30.25 a}$$

它的极限行为如下：

$$\varphi(0)=1,\tag{30.25 b}$$

$$\varphi(x)\sim 8\pi x^{-2}\qquad(x\gg 1).\tag{30.25 c}$$

在高温极限下，对 Ω_r 的主要贡献成为

$$\begin{aligned}\Omega_r &= V(2\beta)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3q\{\ln[1+8\pi\beta\lambda^{-3}e^{\beta\mu}e^2q^{-2}\varphi(q\lambda)\\ &\quad -8\pi\beta\lambda^{-3}e^{\beta\mu}e^2q^{-2}\varphi(q\lambda)\}\\ &= 2V\beta^{\frac{1}{2}}e^3\pi^{-\frac{1}{2}}(2e^{\beta\mu}\lambda^{-3})^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty x^2dx\{\ln[1+x^{-2}\\ &\quad\times\varphi[2e(2\pi\beta e^{\beta\mu}\lambda^{-1})^{\frac{1}{2}}x]]\\ &\quad -x^{-2}\varphi[2e(2\pi\beta e^{\beta\mu}\lambda^{-1})^{\frac{1}{2}}x]\},\end{aligned}\tag{30.26}$$

这里的第三、四行是经过变换 $q^2=8\pi\beta\lambda^{-3}e^{\beta\mu}e^2x^2$ 得到的．这个方程在总的系数及 φ 的宗量中都含有耦合常数 e^2；我们可以

在被积函数中置 $e=0$ 而得到主要的贡献，因为被略去的项是 e^2 的高级项. 方程 (30.25 b) 和 (30.26) 结合起来给出

$$\begin{aligned}\Omega_r(T,V,\mu) &= 2V\beta^{\frac{1}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}e^3(2e^{\beta\mu}\lambda^{-3})^{\frac{3}{2}} \\ &\quad\times\int_0^\infty dx x^2[\ln(1+x^{-2})-x^{-2}] \\ &= -\frac{2}{3}V\beta^{\frac{1}{2}}e^3\pi^{\frac{1}{2}}(2e^{\beta\mu}\lambda^{-3})^{\frac{3}{2}}, \qquad (30.27)\end{aligned}$$

这里收敛的定积分是用分部积分法算出的.

值得注意，Ω_r 是 e^3 数量级，虽然 Σ_r^* 的最低级项形式上是 e^4 数量级. 这是可以理解的，只要考察由方程 (30.26) 展开所得的 Ω_r 的微扰级数就行，

$$\begin{aligned}\Omega_r \approx V(2\beta)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3q\Big\{&-\frac{1}{2}(8\pi\beta e^{\beta\mu}\lambda^{-3})^2(eq^{-1})^4[\varphi(q\lambda)]^2 \\ &+\frac{1}{3}(8\pi\beta e^{\beta\mu}\lambda^{-3})^3(eq^{-1})^6[\varphi(q\lambda)]^3+\cdots\Big\}. \qquad (30.28)\end{aligned}$$

首项 (e^4) 线性发散，下一项 (e^6) 立方发散，如此等等···，各个积分必须在一个下限 $q_{\min}$ 截断. 从方程 (30.26) 看 (也见第 33 节) 是清楚的：自然的截断 $q_{\min}$ 正比于 e，这意味着，每个发散项实际上是 e^3 数量级，因此必须保留在自洽的计算中. 我们算出 Ω_r 的步骤，提供了包括所有这些项的方便途径.

高温电子气体的热力学势现在可写为，

$$\Omega(T,V,\mu)=\Omega_0+\Omega_1+\Omega_r+O(e^4), \qquad (30.29)$$

因为其余的 (有限的) 第二级项是 e^4 数量级. 在下面的讨论中将证明：第一级交换贡献 Ω_1，在经典极限中也可忽略，方程 (30.29) 化为

$$\Omega(T,V,\mu)=\Omega_0(T,V,\mu)+\Omega_r(T,V,\mu). \qquad (30.30)$$

在高温下，理想(经典)气体热力学势 $\Omega_0(T,V,\mu)$ 由下式给出 [方程 (5.24) 和 (5.25)]

$$\Omega_0(T, V, \mu) = -2V\beta^{-1}e^{\beta\mu}\lambda^{-3}, \tag{30.31}$$

而结合方程(30.27)和(30.31)可给出

$$\Omega(T, V, \mu) = -\frac{2V}{\lambda^3}k_BTe^{\mu/k_BT} \times\left[1+\frac{2}{3}(2\pi)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{e^2/\lambda}{k_BT}\right)^{\frac{3}{2}}e^{\mu/2k_BT}\right]. \tag{30.32}$$

热波长 λ 已由方程(30.24)用 T 表示；这样，Ω 已恰当地用 (T, V, μ) 表示.

只有到了这里，才可能求出平均粒子密度作为 μ 的函数

$$N(T, V, \mu) = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{TV} = \frac{2V}{\lambda^3}e^{\mu/k_BT}\left[1+(2\pi)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{e^2/\lambda}{k_BT}\right)^{\frac{3}{2}}e^{\mu/2k_BT}\right]. \tag{30.33}$$

然而，照例我们总是只考虑固定密度的系统；到第一级为止，方程(30.33)容易反过来提供 $\mu(N)$ 的方程

$$\frac{\mu}{k_BT} \approx \ln\left\{\frac{n\lambda^3}{2}\left[1-\pi^{\frac{1}{2}}\left(\frac{e^2n^{\frac{1}{3}}}{k_BT}\right)^{\frac{3}{2}}\right]\right\}, \tag{30.34}$$

这里括号中第一项是经典理想气体的结果，即方程(5.26). 由方程(30.32)和(30.34)给出相应的压强

$$P(T, V, N) = -\frac{\Omega(T, V, N)}{V} \approx nk_BT\left[1-\frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{3}\left(\frac{e^2n^{\frac{1}{3}}}{k_BT}\right)^{\frac{3}{2}}\right], \tag{30.35}$$

这是经典电离气体的 Debye-Hückel 物态方程[1]. 其首要项描写理想气体，而改正项使压强稍微降低. 我们的近似要求 $(e^2n^{\frac{1}{3}}/k_BT)^{\frac{3}{2}} \ll 1$，这保证每个粒子的平均势能 $e^2n^{\frac{1}{3}}$ 远小于每个粒子的热能 k_BT. 这个条件把这里的理论限制于高温和

1) P. Debye and E. Hückel, *Physik. Z.*, **24**: 185(1923).

低密度. 注意对理想气体定律的主要改正是 e^3 数量级，因而用参数 e^2 的任一有限级的微扰级数不可能得到这种改正. 此外，方程 (30.35) 与 $\hbar$ 无关，经典表示式当然应该如此.

Debye-Hückel 的结果是经典式地先考察单个电子邻域中的电荷密度和势而得出的 [比较方程 (14.16) 到 (14.23)]. 如果平均电子密度是 n_0 (恰好等于均匀正电背景的密度)，则 Boltzmann 分布给出

$$\frac{n}{n_0} = e^{e\varphi/k_BT}, \tag{30.36}$$

其中 φ 是电子邻域的静电势 [注意由于介质的电中性，当 $x\to\infty$，$\varphi(x)\to 0$]. 此外，φ 通过 Poisson 方程与电荷密度相联系

$$\begin{aligned}\nabla^2\varphi &= 4\pi e(n-n_0) + 4\pi e\delta(\mathbf{x}) \\ &= 4\pi e n_0[\,e^{e\varphi/k_BT} - 1\,] + 4\pi e\delta(\mathbf{x}) \\ &\approx 4\pi e^2\frac{n_0\varphi}{k_BT} + 4\pi e\delta(\mathbf{x}),\end{aligned} \tag{30.37}$$

在上面所讨论的条件下，即 $e\varphi \ll k_BT$，后一个等式得以成立. 这个方程可改写为

$$(\nabla^2 - q_D^2)\varphi = 4\pi e\delta(\mathbf{x}), \tag{30.38}$$

其中 q_D 是 Debye 屏蔽长度的倒数.

$$q_D^2 \equiv \frac{4\pi n_0 e^2}{k_BT}. \tag{30.39}$$

由于方程 (30.38) 的解为

$$\varphi(x) = -ex^{-1}e^{-q_Dx}, \tag{30.40}$$

围绕电子的电荷云由下式给出

$$\begin{aligned}\rho_{云} &= \left[-\frac{1}{4\pi}\nabla^2\varphi\right]_{x>0} = -\frac{e^2n_0\varphi}{k_BT} \\ &= \frac{e^3n_0}{k_BTx}e^{-q_Dx},\end{aligned} \tag{30.41a}$$

或换一个形式，

$$\rho_{云} = eq_D^2 \frac{e^{-q_D x}}{4\pi x}. \tag{30.41 b}$$

将无限小的电荷元 $-de$ 从无限远移到电荷云的中心需作的功，由原点的静电势给出. 这样，当N个电子的每一个增加电荷 $-de$ 时，系统所作的功 dW 求得为

$$dW = Nde\varphi_{云}(0) = Nde \int \rho_{云}(x) x^{-1} d^3x$$

$$= Nq_D ede = N\left(\frac{4\pi N}{k_B TV}\right)^{\frac{1}{2}} e^2 de. \tag{30.42}$$

因此在每个电子上积累起整个电荷 $-e$ 的过程中，系统作的功是

$$W_{el} = \int_0^e dW = \frac{Ne^3}{3}\left(\frac{4\pi N}{Vk_B T}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{30.43}$$

从方程 (4.4) Helmholtz 自由能的改变可写成

$$dF = dE - TdS - SdT = -dW - SdT, \tag{30.44 a}$$

$$dF|_T = -dW|_T, \tag{30.44 b}$$

这里方程 (30.44 a) 的最后一个形式是根据热力学第一定律得到的. 这样，由电功引起的系集的 Helmholz 自由能的改变是

$$F_{el} = -W_{el} = -\frac{Ne^3}{3}\left(\frac{4\pi N}{Vk_B T}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{30.45}$$

压强的相应改变从方程 (4.5) 得出

$$P_{el} = -\left(\frac{\partial F_{el}}{\partial V}\right)_{T,N} = \frac{F_{el}}{2V}, \tag{30.46}$$

$$\frac{P_{el}}{n_0 k_B T} = -\frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{3}\left(\frac{e^2 n_0^{1/3}}{k_B T}\right)^{\frac{3}{2}}, \tag{30.47}$$

这也是方程 (30.35) 所给出的结果.

现在我们可以验证，Q_1 在经典极限下确实可略去. 当

Boltzmann 统计适用时，方程(30.36)可改写为

$$\Omega_1(T, V, \mu) = -4\pi e^2 V e^{2\beta\mu}(2\pi)^{-6} \times \int d^3p d^3q |\mathbf{p}-\mathbf{q}|^{-2}\exp\frac{-\beta\hbar^2(p^2+q^2)}{2m} = -\frac{V}{(\pi\lambda)^3}\frac{e^2}{\lambda}e^{2\mu/k_BT}\iint d^3x d^3y \frac{e^{-x^2-y^2}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}, \tag{30.48}$$

其中无量纲的定积分收敛. 直截了当的计算表明 Ω_1/Ω_r 的数量级是 $(\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}/m)(e^2 n^{\frac{1}{3}} k_B T)^{-\frac{1}{2}}$，它在经典极限（$\hbar \to 0$）下，或当 $T \to \infty$ 时趋于零. 量 $\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}/m$ 是每个粒子的平均动能，因此，如这个能量远小于每个粒子的平均热能和势能的几何平均值时，Ω_1 变得可以忽略.

最后，我们指出理想气体的经典物态方程（第 5 节）的第一级量子力学改正的数量级是

$$e^{\beta\mu} \approx \frac{1}{2} n\lambda^3 \approx \frac{1}{2}\left(\frac{2\pi\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}}{m k_B T}\right)^{\frac{3}{2}},$$

它在高温和低密度下是很小的. 作为比较，方程(30.12)中包括的 Debye-Hückel 项的数量级是

$$(e^2/\lambda k_B T)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{1}{2}\beta\mu} \approx 2(e^2 n^{\frac{1}{3}}/2k_B T)^{\frac{3}{2}},$$

这在高温和低密度下又是很小的. 显然，只要 $\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}/m \ll e^2 n^{\frac{1}{3}}$，保证平均动能远小于平均势能，量子改正总可忽略. 概括地说，这三个有关的量（动能、势能和热能）必须满足不等式组 $\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}/m \ll e^2 n^{\frac{1}{3}} \ll k_B T$；第一个不等式使得可以使用 Boltzmann 统计并使 Ω_1 变得可忽略，至于第二个不等式则保证 Debye-Hückel 项代表对理想气体定律的小的改正.

零温度极限

上一节只考虑经典极限，但是为了得到收敛的答案，在一

切温度下都必须保留同样的环形图解[1]. 作为一个有意思的例子，现在我们转到相反的（零温度）极限，这时分布函数变成阶跃函数 $n_p^0 = \theta(\mu - \epsilon_p^0)$. 记住 μ 是独立参数，这再一次是重要的. 这样，平均粒子密度和 Fermi 波数 $k_F \equiv (3\pi^2 N/V)^{\frac{1}{3}}$ 要到计算的末尾才能确定，这与以前的基态理论（第三章到第五章）很不相同.

热力学势中的 Ω_1 [方程(30.3)]、Ω_{2b} [方程(30.13 a)]和 Ω_{2c} [方程(30.13 b)]三项，已经算出的形式在低温下是方便的. 剩下的困难是要算出 Ω_r，它给出对 Ω_1 的主要改正，因为它正确地体现了长波时的行为. 既然 $\Pi^0(q, \nu_n)$ 中的被积函数，作为 ν_n 的函数只有一个单极点[方程(30.9)]，就可以用连续的积分 $(2\pi)^{-1}\int d\nu$ 代替方程(30.16)中的分立频率求和 $(\beta\hbar)^{-1}\sum_{\nu_n}$，因为在 $T \to 0$ 时，两者的差别趋于零（见第 29 节的讨论）：

$$\Omega_r(T = 0, V, \mu) = \frac{1}{2} V\hbar(2\pi)^{-4}\int_{-\infty}^{\infty} d\nu \times \int d^3q\{\ln[1 - V(q)\Pi^0(q, \nu)] + V(q)\Pi^0(q, \nu)\}. \tag{30.49}$$

再一次，对小的 q 精确地算出 $\Pi^0(q, \nu)$ 是最重要的，方程(30.9)立即给出

$$\Pi^0(q, \nu) = -2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n^0_{\mathbf{p}}}{i\hbar\nu - (\hbar^2/m)\left(\mathbf{p}\cdot\mathbf{q} + \frac{1}{2}q^2\right)} \underset{q\to 0}{\approx} -2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{p}} n^0_{\mathbf{p}}}{i\hbar\nu - (\hbar^2/m)\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}}, \tag{30.50}$$

因为只要 ν 是有限的，分母中的 q^2 数量级的改正可以略去.

---

1) M. Gell-Mann and K. A. Brueckner, *Phys. Rev.*, **106**: 364(1957).

在零温度下，n_p^0 化为阶跃函数，其梯度成为 $\nabla_p n_p^0 = -\hat{p}\delta(p-k_0)$，这里 k_0 的定义如下

$$\hbar k_0 \equiv (2m\mu)^{\frac{1}{2}}. \tag{30.51}$$

容易完成方程(30.50)中的积分，求得

$$\begin{aligned} \Pi^0(q,\nu) &= -\frac{k_0 m}{2\pi^2\hbar^2}\int_{-1}^{1}\frac{dzz}{z-im\nu/\hbar qk_0} \\ &= -\frac{k_0 m}{\pi^2\hbar^2}R(x) \quad (q\to 0), \end{aligned} \tag{30.52}$$

其中

$$x = \frac{m\nu}{\hbar qk_0}, \tag{30.53}$$

而

$$R(x) = \int_0^1 \frac{dzz^2}{z^2+x^2} = 1 - x\operatorname{arc\,tan}\frac{1}{x}. \tag{30.54}$$

现在回到方程(30.49)，引人无量纲变量 x [方程(30.53)]和 $\zeta = q/k_0$

$$\begin{aligned} \Omega_r = \frac{V\hbar^2 k_0^5 4\pi}{2m(2\pi)^4}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_0^{\infty}\zeta^3 d\zeta \\ \times\left\{\ln\left[1-\frac{4\pi e^2}{k_0^2\zeta^2}\Pi^0\left(k_0\zeta,\frac{\hbar k_0^2 x\zeta}{m}\right)\right]\right. \\ \left.+\frac{4\pi e^2}{k_0^2\zeta^2}\Pi^0\left(k_0\zeta,\frac{\hbar k_0^2 x\zeta}{m}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{30.55}$$

虽然我们实际上只要 e^2 很小时的方程(30.55)的主要项，但是因被积函数是发散的，我们不能按 e^2 幂次直接展开．所以只能将 ζ 的积分分成两部分：从 0 到 $\zeta_0 \ll 1$ 和从 ζ_0 到∞．对于 $\zeta < \zeta_0$，用 $\Pi^0(0,\hbar k_0^2 x\zeta/m) = -(k_0 m/\hbar^2\pi^2)R(x)$ 近似表示 $\Pi^0(k_0\zeta,\hbar k_0^2 x\zeta/m)$ 是可以的，而对 $\zeta > \zeta_0$，必须保留完整的 ζ 依赖性．然而，只要 ζ_0 是有限的，在 $\zeta > \zeta_0$ 区域中，被积函数可按 e^2 的幂次展开，保留 e^4 数量级的主要项．这个步骤

给出 [比较方程 (12.56) 的处理]

$$\Omega_r = \Omega_{r1} + \Omega_{r2}, \tag{30.56}$$

其中

$$\Omega_{r1} = \frac{V\hbar^2 k_0^5}{8\pi^3 m}\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\zeta_0} \zeta^3 d\zeta \left\{ \ln\left[1 + \frac{4m}{k_0\pi\hbar^2} \times \left(\frac{e}{\zeta}\right)^2 R(x)\right] - \frac{4m}{k_0\pi\hbar^2}\left(\frac{e}{\zeta}\right)^2 R(x)\right\}, \tag{30.57 a}$$

$$\Omega_{r2} \approx -\frac{1}{2}\frac{V\hbar^2 k_0^5}{8\pi^3 m}\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{\zeta_0}^{\infty} \zeta^3 d\zeta \times \left[\frac{4\pi e^2}{k_0^2\zeta^2} J^0\left(k_0\zeta, \frac{\hbar k_0^2 x\zeta}{m}\right)\right]^2. \tag{30.57 b}$$

方程 (30.57 a) 中的 ζ 积分现在可显示地算出:

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\zeta_0} \zeta^3 d\zeta \left\{\ln\left[1 + \frac{4e^2}{\zeta^2}\right] - \frac{Ae^2}{\zeta^2}\right\} \\
&= \frac{1}{4} A^2 e^4 \left\{\frac{\zeta_0^4}{A^2 e^4}\left[\ln\left(1 + \frac{Ae^2}{\zeta_0^2}\right) - \frac{Ae^2}{\zeta_0^2}\right] - \ln\left(1 + \frac{\zeta_0^2}{Ae^2}\right)\right\} \\
&\approx \frac{1}{4} A^2 e^4 \left[\ln(Ae^2) - \frac{1}{2} - 2\ln\zeta_0\right] + O(e^6),
\end{aligned} \tag{30.58}$$

这里

$$A(x) = \frac{4mR(x)}{k_0\pi\hbar^2} = \frac{4m}{k_0\pi\hbar^2}\left(1 - x\arctan\frac{1}{x}\right). \tag{30.59}$$

这个表示式显示出 Ω_r 的非解析行为. 虽然对任何 $\zeta_0 > 0$, 定积分是有限的, 但形式的微扰级数的每一项都发散:

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\zeta_0} \zeta^3 d\zeta \left\{\ln\left[1 + \frac{Ae^2}{\zeta^2}\right] - \frac{Ae^2}{\zeta^2}\right\} \\
&= -\frac{1}{2} A^2 e^4 \int_0^{\zeta_0} \frac{d\zeta}{\zeta} + \frac{1}{3} A^3 e^6 \int_0^{\zeta_0} \frac{d\zeta}{\zeta^3} + \cdots.
\end{aligned} \tag{30.60}$$

这个行为类似于描写经典电子气体的方程(30.28). 但是,高温和低温极限在一个重要方面有差别，因为这里的首要项是对数式发散而不是线性发散. 其后果是,当方程(30.60)在下限 $\zeta_{\min}\propto e$ 被截断时,我们看到第一项是 $e^4\ln e$ 数量级,其余的项是 e^4 数量级，这与方程(30.28)中各项的 e^3 依赖性不相同. 正因为已孤立出 $e^4\ln e$ 的行为,我们可以从基态能量的第二级项直接定出相关能的首要项.

随着 $\zeta_0\to 0$，贡献 Ω_{r2} 也显示出对数奇异性，因为当 $\zeta\to 0$，$\Pi^0(k_0\zeta,\hbar^2k_0^2x\zeta/m)$ 逼近一个常数值. 从方程(30.52)容易验证这里的发散性等同于方程(30.58)中的发散性,而量

$$I(x)\equiv-\frac{6}{\pi^3}\lim_{\zeta_0\to 0}\left\{R^2(x)\ln\zeta_0+\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{mk_0}\right)^2+\int_{\zeta_0}^{\infty}\frac{d\zeta}{\zeta}\left[\Pi^0\left(k_0\zeta,\frac{\hbar k_0^2x\zeta}{m}\right)\right]^2\right\}\qquad(30.61)$$

是有限的. 从方程(30.56)、(30.58)和(30.61)得出,正确到 e^4 数量级的 Ω_r 为

$$\Omega_r\approx\frac{V\hbar^2k_0^2}{8\pi^3m}\int_{-\infty}^{\infty}dx\left\{\frac{1}{4}[e^2A(x)]^2\ln[e^2A(x)]-\frac{1}{8}[e^2A(x)]^2+\frac{4\pi}{3}\left(\frac{me^2}{\hbar^2k_0}\right)^2I(x)\right\}.\qquad(30.62)$$

现在计算已简化为由方程(30.59)和(30.61)算出的函数 $A(x)$和$I(x)$的一个一维积分.

在我们完成 Ω_r 的计算以前,把直到 $e^4\ln e$ 和 e^4 数量级的 Ω的所有项加以集中是有益的:

$$\Omega(T,V,\mu)=\Omega_0+\Omega_1+\Omega_r+\Omega_{2b}+2\Omega_{2c}.\qquad(30.63)$$

近似到同一数量级，平均粒子数由下式给出

$$N(T,V,\mu)=-\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V}$$

$$= -\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} - \frac{\partial \Omega_1}{\partial \mu} - \frac{\partial (\Omega_r + \Omega_{2b} + 2\Omega_{2c})}{\partial \mu}, \tag{30.64}$$

这把N表示为μ的函数. 由于方程 (30.63) 和 (30.64) 构成N与Ω之间的参数关系，因此这两个方程提供了简并电子气体的一个正确而完全的描述. 不过，消去μ通常较为方便；这是容易做到的，只要把μ展开为微扰级数[1]

$$\mu = \mu_0 + \mu_1 + \mu_2 + \cdots, \tag{30.65}$$

其中下标表示e^2的数量级级数，然后把方程 (30.64) 右边每一项在值 $\mu = \mu_0$ 附近展开为 Taylor 级数. 方程(30.64)现在可按e^2的数量级逐级反转过来，首先两项给出

$$N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{\mu=\mu_0}, \tag{30.66}$$

$$\mu_1 = -\frac{(\partial \Omega_1/\partial \mu)_{\mu=\mu_0}}{(\partial^2 \Omega_0/\partial \mu^2)_{\mu=\mu_0}}. \tag{30.67}$$

这里第一个方程决定μ_0作为N的函数，而第二个方程定出用μ_0(从而用N)表示的μ_1. 注意μ_0正是在温度T而密度为N/V的理想 Fermi 气体的化学势.

从μ到N的变量变换表明相关的热力学函数是Helmholtz自由能[见方程(4.5)]

$$F(T, V, \mu) = E - TS = \Omega + \mu N,$$

它可以在形式上展开到e^2的第二级项:

$$F = \Omega_0(\mu_0) + (\mu_1 + \mu_2)\left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu}\right)_{\mu=\mu_0} + \frac{1}{2}\mu_1^2\left(\frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2}\right)_{\mu=\mu_0} + \Omega_1(\mu_0)$$

1) 这里的处理根据 W. Kohn and J. M. Luttinger, *Phys. Rev.*, **118**: 41 (1960).

$$+\mu_1\left(\frac{\partial\Omega_1}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_0}+\Omega_r(\mu_0)+\Omega_{2b}(\mu_0)+2\Omega_{2c}(\mu_0)$$
$$+\mu_0N+(\mu_1+\mu_2)N. \tag{30.68}$$

由于方程(30.66)，第二项和末项相消，因此根本不需要 μ_2 的显式. 方程 (30.67) 和 (30.68) 可以结合起来给出

$$F(T,V,N)=F_0(T,V,N)+\Omega_1(\mu_0)+\Omega_r(\mu_0)+\Omega_{2b}(\mu_0)+\left[2\Omega_{2c}(\mu_0)-\frac{1}{2}\times\frac{(\partial\Omega_1/\partial\mu)^2_{\mu=\mu_0}}{(\partial^2\Omega_0/\partial\mu^2)_{\mu=\mu_0}}\right], \tag{30.69}$$

其中 μ_0 是N的函数，而 $F_0(T,V,N)=\Omega_0(\mu_0)+\mu_0N$ 是理想 Fermi 气体的 Helmholtz 自由能.

在零温度下，现在的描述变得特别简单[见方程 (5.53)]:

$$\begin{cases}\Omega_0(0,V,\mu)=-\dfrac{2}{15\pi^2}V\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\mu_0^{5/2},\\ \left(\dfrac{\partial\Omega_0(0,V,\mu)}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_0}=-\dfrac{1}{3\pi^2}V\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\mu_0^{3/2},\\ \left(\dfrac{\partial^2\Omega_0(0,V,\mu)}{\partial\mu^2}\right)_{\mu=\mu_0}=-\dfrac{1}{2\pi^2}V\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\mu_0^{1/2}.\end{cases} \tag{30.70}$$

在这极限下，零级项 μ_0 由下式给出，

$$\mu_0(N)=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\equiv\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}=\varepsilon_F^0, \tag{30.71}$$

这里 k_F 是通常的 Fermi 波数. 以下的讨论表明，方程(30.69)的末项(在方括号中的)在 $T=0$ 为零. 因此，N粒子的相互作用系统的基态能量具有下列展开式

$$E=E_0+\Omega_1(\varepsilon_F^0)+\Omega_r(\varepsilon_F^0)+\Omega_{2b}(\varepsilon_F^0), \tag{30.72}$$

因为当 $T\to0$，$F\equiv E-TS\to E$. 这里的第一项 E_0 是相应的理想 Fermi 气体的基态能量 $\left[E_0=\dfrac{3}{5}N\varepsilon_F^0\right]$，而 $\Omega_1(\varepsilon_F^0)$

是第一级交换能[比较方程(3.34)和(30.3 b)]，

$$\Omega_1(\epsilon_F^0) = -4\pi e^2 V(2\pi)^{-6}\int d^3p d^3q\,|\mathbf{p}-\mathbf{q}|^{-2} \times \theta(k_F-p)\theta(k_F-q). \tag{30.73}$$

方程(30.72)的其余诸项清楚地代表对相关能的主要贡献

$$E_{\text{相关}} = \Omega_r(\epsilon_F^0) + \Omega_{2b}(\epsilon_F^0). \tag{30.74}$$

相关能的居于支配地位的项，来自 Ω_r 的长波部分．引进通常的无量纲单位[见第3节]并且令 k_0 等同于 k_F，可写出

$$E_{\text{相关}} = \frac{Ne^2}{2a_0}\epsilon_{\text{相关}}, \tag{30.75}$$

其中由方程(30.59)和(30.62)得

$$\epsilon_{\text{相关}} = \frac{3}{\pi^3}\ln r_s\int_{-\infty}^{\infty}[R(x)]^2dx\,(r_s\to 0). \tag{30.76}$$

用方程(30.54)的积分表示，很容易完成这积分，

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}dx[R(x)]^2 &= \int_0^1 dy\int_0^1 dz\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\frac{y^2z^2}{(y^2+x^2)(z^2+x^2)}\\ &= \pi\int_0^1 dy\int_0^1 dz\,\frac{yz}{y+z}\\ &= \frac{2}{3}\pi(1-\ln 2).\end{aligned} \tag{30.77}$$

这样

$$\epsilon_{\text{相关}} = \frac{2}{\pi^2}(1-\ln 2)\ln r_s + \text{常数}\qquad (r_s\to 0), \tag{30.78}$$

与方程(12.61)符合．

从方程(30.74)也可以得到常数项，但是计算的困难很大．在方程(30.13 a)和(30.62)中引入同样的无量纲单位，可给出

$$\Omega_{2b}(\epsilon_F^0) = \frac{Ne^2}{2a_0}\epsilon_2^b, \tag{30.79 a}$$

$$\Omega_r(\epsilon_F^0)=\frac{Ne^2}{2a_0}\left\{3\pi^{-3}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,[R(x)]^2\left[\ln(4\alpha r_s\pi^{-1})\right.\right.$$

$$\left.\left.+\ln R(x)-\frac{1}{2}\right]+\delta\right\},\qquad(30.79\text{ b})$$

这里 $\alpha=(4/9\pi)^{\frac{1}{3}}$，$\epsilon_2^b$ 是习题 1.4 给出的定积分，而

$$\delta\equiv\int_{-\infty}^{\infty}dxI(x)=\lim_{\zeta\to 0}\left\{-\frac{4}{\pi^2}(1-\ln 2)\ln\zeta_0-\frac{3}{2\pi^4}\int_{\zeta_0}^{\infty}\frac{dq}{q^2}\right.$$

$$\times\iint d^3k d^3p\,\theta(1-k)\theta(1-p)\theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}|-1)$$

$$\left.\times\theta(|\mathbf{k}+\mathbf{q}|-1)[q^2+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{p}+\mathbf{k})]^{-1}\right\}\qquad(30.80)$$

它与 r_s 无关．δ 的最后的表示式，正是消除了对数奇异性后的 ϵ_2^r（见习题 1.4 和 1.5）；它的推导的概要见习题 8.7．将方程 (30.77) 和 (30.79) 代入方程 (30.74) 给出

$$\epsilon_{\text{相关}}=\frac{2}{\pi^2}(1-\ln 2)\left[\ln\left(\frac{4\alpha r_s}{\pi}\right)+\langle\ln R\rangle_{\text{av}}-\frac{1}{2}\right]$$

$$+\delta+\epsilon_2^b.\qquad(30.81)$$

这里数字常数 $\langle\ln R\rangle_{\text{av}}$ 和 δ 必须用数值计算求得[1]

$$\langle\ln R\rangle_{\text{av}}\equiv\frac{\int_{-\infty}^{\infty}dxR^2\ln R}{\int_{-\infty}^{\infty}dxR^2}=-0.551,\qquad(30.82\text{ a})$$

$$\delta=-0.0508,\qquad(30.82\text{ b})$$

至于九维积分 ϵ_2^b 已由 Onsager[2] 解析地算出

$$\epsilon_2^b=\frac{1}{3}\ln 2-\frac{3}{2\pi^2}\zeta(3)\approx 0.048.\qquad(30.83)$$

相关能的最后表示式成为

---

1) M. Gell-Mann and K. A. Bruckner，前引文.

2) L. Onsager, L. Mittag., and M. J. Stephen, *Ann. Physik*, **18**: 71(1966).

$$\varepsilon_{\text{相关}} = 0.0622\ln r_s - 0.094 + O(r_s\ln r_s), \quad (30.84)$$

与零温度理论推出的方程(12.62)完全一致. 有意思的是,这里的零温度近似,在高密度($n^{\frac{1}{3}}e^2 \ll \hbar^2 n^{\frac{2}{3}}/m$)下是有效的,这与前面的经典计算完全不同. 但是,在两种情况下,势能 $n^{\frac{1}{3}}e^2$ 跟其他有关的能量(在 $T=0$ 是 $\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}/m$,在 $T\to\infty$ 是 k_BT)相比较都是很小的.

为了完成这个计算[1],必须证明方程(30.69)中最后一项的确为零. 第二级改正 Ω_{2c} [方程(30.13b)]在一切温度下可改写成

$$\Omega_{2c}(T,V,\mu) = \frac{1}{2}V\int\frac{d^3k\,d^3p\,d^3q}{(2\pi)^9}V(\mathbf{k}-\mathbf{q})V(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \times n_k^0 n_p^0\frac{\partial n_q^0}{\partial\varepsilon_q^0}, \quad (30.85)$$

因为

$$-\beta n_q^0(1-n_q^0) = \frac{\partial n_q^0}{\partial\varepsilon_q^0}.$$

在 $T\to 0$ 的极限下,因子 $\partial n_q^0/\partial\varepsilon_q^0$ 成为 $-\delta(\mu-\varepsilon_q^0)$,可以写出

$$\Omega_{2c}(0,V,\mu_0) = -\frac{1}{2}V(2\pi)^{-3}\int d^3q\,\delta(\mu_0-\varepsilon_q^0)(f_\mathbf{q})^2. \quad (30.86)$$

这里

$$f_\mathbf{q} \equiv (2\pi)^{-3}\int d^3k\,V(\mathbf{k}-\mathbf{q})n_k^0|_{\mu=\mu_0,T=0} = (2\pi)^{-3}\int d^3k\,V(\mathbf{k}-\mathbf{q})\theta(\mu_0-\varepsilon_k^0), \quad (30.87)$$

而且如方程(30.69)所要求,已经置 $\mu=\mu_0$. 类似的计算[比较 $T=0$ 的方程(30.3b)]给出

---

1) W. Kohn and J. M. Luttinger 首先强调这点,前引文.

$$\left(\frac{\partial \Omega_1}{\partial \mu}\right)_{\mu=\mu_0} = -V\int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^6} V(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \times \left[n_k^0 \frac{\partial n_q^0}{\partial \mu} + n_q^0 \frac{\partial n_k^0}{\partial \mu}\right]_{\mu=\mu_0, T=0}$$

$$= -2V(2\pi)^{-3}\int d^3q \delta(\mu_0 - \varepsilon_q^0) f_{\mathbf{q}}. \qquad (30.88)$$

最后，直接的计算给出

$$\left(\frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2}\right)_{\mu=\mu_0} = -2V\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\delta(\mu_0 - \varepsilon_q^0), \qquad (30.89)$$

这等价于方程 (30.70) 的最后一行. 用下列关于 Fermi 面上的平均的定义

$$\langle \cdots \rangle_F = \frac{(2\pi)^{-3}\int d^3q \cdots \delta(\mu_0 - \varepsilon_q^0)}{(2\pi)^{-3}\int d^3q \delta(\mu_0 - \varepsilon_q^0)}, \qquad (30.90)$$

则方程 (30.69) 的末项取的形式为

$$2\Omega_{2c}(\mu_0) - \frac{1}{2}\frac{(\partial \Omega_1/\partial \mu)^2_{\mu=\mu_0}}{(\partial^2 \Omega_0/\partial \mu^2)_{\mu=\mu_0}}$$

$$= -V[\langle (f_{\mathbf{q}} - \langle f_{\mathbf{q}}\rangle_F)^2\rangle_F](2\pi)^{-3}\int d^3q \delta(\mu_0 - \varepsilon_q^0)$$

$$\leqslant 0. \qquad (30.91)$$

这项对基态能量的贡献，正比于在未微扰的 Fermi 面上的 f_q 的均方偏差，因而决不会提高能量. 此外，对于球形的 Fermi 面，这改正显然为零，这正是均匀正电背景中的电子气体的情况.

上述相消过程是关于自旋为 1/2 的费米子的一条普遍定理[1] 的特例，这条普遍定理说，只要未微扰的 Fermi 面是球对

1) W. Kohn and J. M. Luttinger, 前引文; J. M. Luttinger and J. C. Ward, 前引文.

称的，并且相互作用在空间旋转下不变，则有限温度理论的 $T \to 0$ 极限给出的基态能量，与用 $T = 0$ 的理论（无论是用 Feynman 形式或用 Brueckner-Goldstone 形式）算出的基态能量相同. 这个结果决不是显然的，因为这两条研究途径，以完全不同的方式描述相互作用系统. $T \neq 0$ 的理论，计算热力学势 Ω 作为参数 μ 的函数，它的 $T \to 0$ 极限涉及 Fermi 分布函数的积分，这个分布函数在能量等于 μ 处是奇异的. 在计算的结尾，可以消去 μ 而用粒子密度 N/V 代替它，而 μ 则定义了相互作用基态的 Fermi 能 ϵ_F. 另一方面，通常的 $T = 0$ 的理论，从一开始就考虑固定的粒子数 N，并且算出基态能量作为两体势的耦合常数的一个级数. 这级数中每一项都涉及未微扰的 Fermi 分布函数的积分，这分布函数在未受扰的 Fermi 能处 $\epsilon_F^0 = (\hbar^2/2m)(3\pi^2 N/V)^{\frac{2}{3}}$ 不连续.

比较这两个理论，我们立即注意到 $T \neq 0$ 的展开式中有一些项是在 $T = 0$ 时根本不加考虑的. 例如，$\Sigma^{\star}_{(2)c}$ 的零温度形式含有对 $\theta(k_F - q)\theta(q - k_F)$ 的积分，因而为零 [习题 3.12]. 但是，在有限温度下，由于温度有一定变化范围，给出一个非零值，这值甚至在 $T = 0$ 极限下仍保持为有限. 所有这些附加图解在零温度都含有奇异因子，例如 $\delta(\epsilon_k^0 - \mu)$ 或其导数，至于两个理论的共同图解则在 $T = 0$ 只含有阶跃函数. 由于 $T = 0$ 的理论早于 $T \neq 0$ 的理论，因而这些附加项习惯上说成是反常的. 这两个理论的不同，还因为有一个是用准确的化学势 $\mu \equiv \epsilon_F$，而另一个则用未微扰的 Fermi 能 $\epsilon_F^0 \equiv \mu_0$. $\Omega(T = 0, \epsilon_F)$ 在值 $\Omega(T = 0, \epsilon_F^0)$ 的邻域上的 Taylor 级数，涉及用 ϵ_F^0 处的阶跃函数把 ϵ_F 处的阶跃函数展开；这个展开导致附加的 δ 函数和 δ 函数的导数. Kohn-Luttinger-Ward 定理的内容是：由于 Fermi 能从 ϵ_F 移动到 ϵ_F^0 所引起的额外贡献，精确地抵消反常图解，而剩下基态能量的

Brueckner-Goldstone 级数.

如果微扰论提供相互作用系统的正确描述，则有限温度理论的 $T = 0$ 极限，必然就耦合常数的任意值给出真正的基态. 反之，$T = 0$ 理论只给出从无相互作用基态绝热发展而得来的哈密顿函数的本征态. 对于任意的系统，这两条途径可以给出不同的本征态，如均匀磁场中的理想 Fermi 气体这个简单例子所示(习题 7.5). 因此 Kohn-Luttinger-Ward 定理可解释为规定了一个充分条件，保证 $T = 0$ 的理论的确给出真正的基态. 而遗憾的是，必要条件这个非常重要的问题，仍然尚未解决.

习　　题

8.1　试验证在 Hartree-Fock 近似中，随着 $T \to 0$，电子气体的 C_V 的变化有如 $-T(\ln T)^{-1}$. [比较方程 (30.3) 后面的讨论]

8.2　(a) 试用习题 4.9 关于电子气的最低级正规自能 $\hbar\Sigma^{*}_{(1)}(\mathbf{q})$ 和有效质量 m^* 的结果，证明，零温度下相应的热容量满足 $C_V/T = 0$.

(b) 长波库仑相互作用，由于介质的存在而按方程 (12.65) 被修改. 试证明，当 $r_s \to 0$，正确的低温热容量由 $C_V/C_V^F = \{1 - (\alpha r_s/2\pi)[\ln(\alpha r_s/\pi) + 2] + \cdots\}^{-1}$ 给出，其中 C_V^F 是无相互作用 Fermi 气体的热容量[1].

8.3　试用有限温度 Green 函数重作习题 (4.4).

8.4　(a) 对自旋为 1/2 的费米子均匀系，试用 Feynman 规则算出图 30.2 a 和 30.2 b 所示的对温度 Green 函数的第二级自能贡献. 求出对热力学势的相应贡献，并且算出必需

1) M. Gell-Mann, *Phys. Rev.*, **106**: 369(1957).

的频率求和(见习题 7.3),以得出

$$\Omega_{2a} = -2V\iiint(2\pi)^{-9}d^3q\,d^3p\,d^3k\,|V(\mathbf{q})|^2 n^0_{\mathbf{k}} n^0_{\mathbf{p}}(1-n^0_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \times (1-n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})[\epsilon^0_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+\epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\epsilon^0_{\mathbf{k}}-\epsilon^0_{\mathbf{p}}]^{-1}$$

以及方程 (30.13 a).

(b) 考虑高温下的电子气,这时 $n^0_{\mathbf{k}} = e^{\beta\mu}\exp(-\beta\epsilon^0_{\mathbf{k}}) \ll 1$. 试用柱座标 $[\mathbf{k} = \hat{q}k_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp}]$ 证明

$$\Omega_{2a} = -\frac{mVe^4}{\pi^3\hbar^2}e^{2\beta\mu}\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^2\int\frac{d^3q}{q^4}\mathscr{P}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{\parallel}\int_{-\infty}^{\infty}dk_{\parallel} \times \exp\left[-\frac{\beta\hbar^2(k_{\parallel}^2+p_{\parallel}^2)}{2m}\right]\frac{1}{q(p_{\parallel}+k_{\parallel})+q^2}.$$

从而作出结论,在小动量传递 ($q \to 0$) 下,Ω_{2a} 是线性发散的.

8.5 (a) 在经典极限下,$n^0_{\mathbf{p}} = \exp(\beta\mu - \beta\epsilon^0_{\mathbf{p}})$,试证明,对于大的 $q\lambda = q(2\pi\hbar^2/mk_BT)^{\frac{1}{2}}$ 和 $|l|$,$\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_l)$ 有渐近形式 $\Pi^0(\mathbf{q}, \nu_l) \sim -16\pi\beta e^{\beta\mu}(q^2/\lambda)[(q\lambda)^4 + (8\pi^2 l)^2]^{-1}$.

(b) 如果 $\delta\Omega_r$ 表示方程 (30.21) 中 $l > 0$ 的诸项之和,试验证 $\delta\Omega_r/\Omega_r = O[(e^2n^{\frac{1}{3}})^{\frac{1}{2}}(n^{\frac{2}{3}}\hbar^2/m)^{\frac{1}{2}}(1/k_BT)]$,其中 Ω_r 取自方程 (30.27).

8.6 (a) 试用方程 (30.32) 计算经典极限下的电子气的比热 $C_V = \frac{3}{2}Nk_B\left[1 + \frac{1}{3}\pi^{\frac{1}{2}}(e^2n^{\frac{1}{3}}/k_BT)^{\frac{3}{2}}\right]$.

(b) 试在 Debye 理论中从方程 (30.45) 推导这个结果.

8.7 试用积分表示 (30.9) 算出 $(1/\beta\hbar)\sum_{\nu}[\Pi^0(\mathbf{q},\nu)]^2$. 在零温度极限下,这个和可以用对连续变量的积分来近似. 从而算出 $\int_{-\infty}^{\infty}dx\,I(x)$,这里 $I(x)$ 是方程 (30.61) 给出的. 验证方程 (30.80).

第九章　实时 Green 函数和线性响应

在零温度理论中，单粒子 Green 函数 $G(\mathbf{k}, \omega)$ 的极点给出，系统增添或减少一个粒子的激发态的能量和寿命．类似地，函数 $D^{R}(\mathbf{k}, \omega)$ 确定，电子气中杂质的屏蔽以及像等离子体振荡或零声之类集体密度模的谱．但是，在整个第八章中，温度 Green 函数只用于计算平衡热力学性质．现在我们将引入实时 Green 函数 $\bar{G}$ 从而完成有限温度下的描述，$\bar{G}$ 包含有限温度下的激发态的频率和寿命．

31. 推广的 Lehmann 表示

我们将 Green 函数的概念从场算符编时乘积的基态期待值，推广为这同一个量的系综平均值，以此开始我们的讨论．

$\bar{G}$ 的定义

实时格林函数是直接类比于 $T=0$ 的方程(7.1)定义的：

$$i\bar{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G T[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}^{\dagger}_{K\beta}(\mathbf{x}'t')]\}, \quad (31.1)$$

其中 $\hat{\rho}_G$ 是巨正则系综的统计算符[方程 (4.15)]，而 $\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t)$ 是相对于哈密顿函数 $\hat{K}$ 的真正的 Heisenberg 算符

$$\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t) \equiv e^{i\hat{K}t/\hbar}\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x})e^{-i\hat{K}t/\hbar}. \quad (31.2)$$

像第三章那样，对于费米子，编时算符 T 含有因子 $(-1)^{P}$．方程 (31.1) 有一个重要的新特点，$\bar{G}$ 除了依赖于通常的时空变量外还与 T 和 μ 有关．

在大多数情况下，哈密顿函数不含时间，因而得到的

Green 函数只含有组合 $t-t'$. 此外，我们将只考虑均匀系，Green 函数取简单的形式

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \bar{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t'). \tag{31.3}$$

最后，我们不考虑外磁场和铁磁性，因此 $\bar{G}_{\alpha\beta}$ 对矩阵指标是对角的，

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t) = \delta_{\alpha\beta}\bar{G}(\mathbf{x}, t). \tag{31.4}$$

这些假设中的每一条都可放宽，但是随后的分析会因而比不放宽时麻烦得多.

设 t 是正的. 于是，方程 (31.1) 成为

$$i\bar{G}^{>}(\mathbf{x}, t) = (2s+1)^{-1}\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}^{\dagger}_{K\alpha}(0)\}. \tag{31.5}$$

在这里的均匀系统中，因为 $\hat{\mathbf{P}}$ 与 $\hat{K}$ 可对易，Heisenberg 算符可以改写为[比较方程 (7.52)]

$$\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}, t) = e^{-i\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{x}/\hbar}e^{i\hat{K}t/\hbar}\psi_{\alpha}(0)e^{-i\hat{K}t/\hbar}e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{x}/\hbar}. \tag{31.6}$$

方程 (31.5) 和 (31.6) 的结合给出

$$\begin{aligned} i\bar{G}^{>}(\mathbf{x}, t) = (2s+1)^{-1}\mathrm{Tr}\{&e^{\beta(\Omega-\hat{K})}e^{-i\mathbf{P}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \\ &\times e^{it/\hat{K}\hbar}\hat{\psi}_{\alpha}(0)e^{-i\hat{K}t/\hbar}e^{i\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{x}/\hbar}\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(0)\}, \end{aligned} \tag{31.7}$$

这里迹可以用任一基底算出. 特别方便的选择是 $\hat{H}$、$\hat{\mathbf{P}}$ 和 $\hat{N}$ 的准确本征态:

$$\begin{cases} \hat{K}|m\rangle = K_m|m\rangle = (E_m - \mu N_m)|m\rangle, \\ \hat{\mathbf{P}}|m\rangle = \mathbf{P}_m|m\rangle, \end{cases} \tag{31.8}$$

我们求出

$$\begin{aligned} i\bar{G}^{>}(\mathbf{x},t) &= (2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{mn}e^{-\beta K_m}e^{-i\mathbf{P}_m\cdot\mathbf{x}/\hbar}e^{iK_mt/\hbar}\langle m|\hat{\psi}_{\alpha}(0)|n\rangle \\ &\quad\times e^{-iK_nt/\hbar}e^{i\mathbf{P}_n\cdot\mathbf{x}/\hbar}\langle n|\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(0)|m\rangle \\ &= (2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{mn}e^{-\beta K_m}e^{i(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)\cdot\mathbf{x}/\hbar} \\ &\quad\times e^{-i(K_n-K_m)t/\hbar}|\langle m|\hat{\psi}_{\alpha}|n\rangle|^2. \end{aligned} \tag{31.9}$$

用类似的方法，对于 $t<0$，相应的函数成为

$$i\bar{G}^{<}(\mathbf{x},t)=\pm(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{K}}\hat{\phi}^{\dagger}_{K\alpha}(0)\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t)\}$$
$$=\pm(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{mn}e^{-\beta K_n}e^{i(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$
$$\times e^{-i(K_n-K_m)t/\hbar}|\langle m|\hat{\phi}_\alpha|n\rangle|^2. \qquad (31.10)$$

总的 Green 函数是两项之和

$$\bar{G}(\mathbf{x},t)=\theta(t)\bar{G}^{>}(\mathbf{x},t)+\theta(-t)\bar{G}^{<}(\mathbf{x},t), \qquad (31.11)$$

它的 Fourier 变换可以完全像在方程 (7.54) 中那样计算，

$$\bar{G}(\mathbf{k},\omega)=(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{mn}\Big\{(2\pi)^3$$
$$\times\delta[\mathbf{k}-\hbar^{-1}(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)]|\langle m|\hat{\phi}_\alpha|n\rangle|^2$$
$$\times\Big[\frac{e^{-\beta K_m}}{\omega-\hbar^{-1}(K_n-K_m)+i\eta}$$
$$\mp\frac{e^{-\beta K_n}}{\omega-\hbar^{-1}(K_n-K_m)-i\eta}\Big]\Big\}. \qquad (31.12)$$

方程 (31.12) 表明 $\bar{G}(\mathbf{k},\omega)$ 是 $\hbar\omega$ 的半纯函数，其单极点位于一组数值 $K_n-K_m\equiv E_n-E_m-\mu(N_n-N_m)$ 处；相应的留数正比于$|\langle m|\hat{\phi}|n\rangle|^2$，而且如果 $N_n\neq N_m+1$，则留数为零．由于$|m\rangle$ 和$|n\rangle$ 两者都可以属于激发态，所以有限温度下的系综平均显然是零温度表示式的推广．然而，对于在 $T=0$ 的费米子，容易证明 (习题 9.1)

$$\bar{G}(\omega-\mu/\hbar)|_{T=0}=G(\omega), \qquad (31.13)$$

这里 $G(\omega)$ 是第三章中的基态 Green 函数。

推迟和超前函数

如ω是实的，用方程 (7.69) 容易求得 $\bar{G}(\mathbf{k},\omega)$ 的实部和虚部：

$$\bar{G}(\mathbf{k},\omega)=(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{m_{\neq}}e^{-\beta K_m}(2\pi)^3$$

$$\times \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)]|\langle m|\hat{\psi}_\alpha|n\rangle|^2$$
$$\times \{\mathscr{P}[\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)]^{-1}(1 \mp e^{-\beta(K_n - K_m)})$$
$$- i\pi\delta[\omega - h^{-1}(K_n - K_m)](1 \pm e^{-\beta(K_n - K_m)})\}, \tag{31.14}$$

这里 $\mathscr{P}$ 表示主值. 方程 (31.14) 的虚部可改写成

$$\mathrm{Im}\bar{G}(\mathbf{k}, \omega) = -(2s+1)^{-1}\pi e^{\beta\Omega}\sum_{mn} e^{-\beta K_m}(2\pi)^3$$
$$\times \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)]$$
$$\times |\langle m|\hat{\psi}_\alpha|n\rangle|^2\delta[\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)]$$
$$\times (1 \pm e^{-\beta\hbar\omega}), \tag{31.15}$$

容易验证此时实部成为

$$\mathrm{Re}\bar{G}(\mathbf{k}, \omega) = -\mathscr{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\frac{\mathrm{Im}\bar{G}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega'}\frac{1 \mp e^{-\beta\hbar\omega'}}{1 \pm e^{-\beta\hbar\omega'}}$$
$$= -\mathscr{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\frac{\mathrm{Im}\bar{G}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega'}$$
$$\times \left[\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega'\right)\right]^{\pm 1}, \tag{31.16}$$

这首先由 Landau 推得[1].

对于许多目的来说，较方便的是处理推迟或超前的实时 Green 函数 [比较方程 (7.62)]:

$$\begin{cases} i\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv \theta(t - t')\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t), \\ \qquad\qquad \psi^\dagger_{K\beta}(\mathbf{x}'t')]_\mp\}, \\ i\bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv -\theta(t' - t)\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t), \\ \qquad\qquad \hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(\mathbf{x}', t')]_\mp\}. \end{cases} \tag{31.17}$$

我们又是只考虑均匀的、不含时间的且无磁场的系统，在这种情况下，$\bar{G}^{\mathrm{R}}$ 和 $\bar{G}^{\mathrm{A}}$ 具有的结构与方程 (31.4) 中的相同，它们

---

1) L. D. Landau *Sov. Phys.-JETP*, **7**:182 (1958).

的 Fourier 变换容易求得为

$$\begin{cases}\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)=(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum\limits_{mn}\{e^{-\beta K_m}(2\pi)^3\\ \quad\times\delta[\mathbf{k}-\hbar^{-1}(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)]|\langle m|\hat{\phi}_a|n\rangle|^2\\ \quad\times(1\mp e^{-\beta(K_n-K_m)})\\ \quad\times[\omega-\hbar^{-1}(K_n-K_m)+i\eta]^{-1}\},\\ \bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k},\omega)=(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum\limits_{mn}\{e^{-\beta K_m}(2\pi)^3\\ \quad\times\delta[\mathbf{k}-\hbar^{-1}(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)]|\langle m|\hat{\phi}_a|n\rangle|^2\\ \quad\times(1\mp e^{-\beta(K_n-K_m)})\\ \quad\times[\omega-\hbar^{-1}(K_n-K_m)-i\eta]^{-1}\}.\end{cases}\tag{31.18}$$

显然，$\bar{G}^{\mathrm{R}}$ 和 $\bar{G}^{\mathrm{A}}$ 两者都是 ω 的半纯函数；另外，$\bar{G}^{\mathrm{R}}(\bar{G}^{\mathrm{A}})$ 在上(下)半 ω 平面是解析的.

推迟和超前 Green 函数是紧密相关的. 用依赖于 T 和 μ 两者的定义式

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{k},\omega)\equiv{}&(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{mn}\{e^{-\beta K_m}(2\pi)^3\delta[\mathbf{k}\\ &-\hbar^{-1}(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)]2\pi\delta[\omega-\hbar^{-1}(K_n-K_m)]\\ &\times(1\mp e^{-\beta\hbar\omega})|\langle m|\hat{\phi}_a|n\rangle|^2\},\end{aligned}\tag{31.19}$$

则 $\bar{G}^{\mathrm{R}}$ 和 $\bar{G}^{\mathrm{A}}$ 的虚部可以写为

$$\begin{cases}\mathrm{Im}\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)=-\dfrac{1}{2}\rho(\mathbf{k},\omega)\\ \mathrm{Im}\bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k},\omega)=\dfrac{1}{2}\rho(\mathbf{k},\omega).\end{cases}\tag{31.20}$$

此外，方程 (31.18) 和 (31.19) 的结合给出积分表示

$$\begin{cases}\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\rho(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\omega'+i\eta},\\ \bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k},\omega)=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\rho(\mathbf{k},\omega')}{\omega-\omega'-i\eta},\end{cases}\tag{31.21}$$

它们的实部形式上等同于零温度下的色散关系 [方程

(7.70)]. 如果引进复变量 z 的函数

$$\Gamma(\mathbf{k}, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega')}{z - \omega'} \tag{31.22}$$

则 $\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k}, \omega)$ 和 $\bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k}, \omega)$ 分别代表 z 从上面和下面趋于实轴时的 Γ 的边界值:

$$\begin{cases} \bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k}, \omega) = \Gamma(\mathbf{k}, \omega + i\eta) \\ \bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k}, \omega) = \Gamma(\mathbf{k}, \omega - i\eta). \end{cases} \tag{31.23}$$

鉴于 $T = 0$ 时的 G、G^{R} 和 G^{A} 之间的一般关系式 [方程 (7.67) 和 (7.68)], $\rho(\mathbf{k}, \omega)$ 也能确定编时 Green 函数的 Fourier 变换是不足为奇的. 用方程 (31.14) 和 (31.19) 直截了当的计算表明, $\bar{G}(\mathbf{k}, \omega)$ 具有下列另一种表示:

$$\begin{aligned} \bar{G}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \rho(\mathbf{k}, \omega') \Big\{ & \mathscr{P} \frac{1}{\omega - \omega'} \\ & - i\pi \left[\tanh\left(\frac{1}{2} \beta\hbar\omega \right) \right]^{\mp 1} \delta(\omega - \omega') \Big\} \\ = & [1 \mp e^{-\beta\hbar\omega}]^{-1} \bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k}, \omega) \\ & + [1 \mp e^{\beta\hbar\omega}]^{-1} \bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k}, \omega). \end{aligned} \tag{31.24}$$

对实的 ω, 所有三个 Green 函数具有相等的实部

$$\mathrm{Re}\bar{G}(\mathbf{k}, \omega) = \mathrm{Re}\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k}, \omega) = \mathrm{Re}\bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k}, \omega), \tag{31.25}$$

至于虚部则由方程 (31.20) 和下式给出,

$$\mathrm{Im}\,\bar{G}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{2} \left[\tanh\left(\frac{1}{2} \beta\hbar\omega \right) \right]^{\mp 1} \rho(\mathbf{k}, \omega). \tag{31.26}$$

在零温度下的费米子的特例, 方程 (31.24) 取熟悉的形式

$$\begin{aligned} \bar{G}(\mathbf{k}, \omega)|_{T=0} = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \rho(\mathbf{k}, \omega')|_{T=0} \\ & \times \left[\frac{\theta(\omega)}{\omega - \omega' + i\eta} + \frac{\theta(-\omega)}{\omega - \omega' - i\eta} \right], \end{aligned} \tag{31.27}$$

这应该与方程 (7.67) 和 (31.13) 比较.

权重函数 $\rho(\mathbf{k}, \omega)$ 包含系统的重要物理性质. 虽然 ρ 的

精确形式只有用详细计算才能算出，但是有某些一般性质可直接从它的定义方程（31.19）推得．如ω是正的，则求和中的每一项都是正的；更一般地说，ρ有下述正定性质：

$$\begin{cases}(\mathrm{sgn}\omega)\rho(\mathbf{k},\omega)\geqslant 0 & \text{（玻色子），}\\ \rho(\mathbf{k},\omega)\geqslant 0 & \text{（费米子）．}\end{cases} \tag{31.28}$$

另外，ρ满足一个重要的求和定则，现在我们要把它推导出来．考虑下列积分

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}i\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)e^{-i\omega\eta}&=i\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega' d\omega}{(2\pi)^2}\frac{\rho(\mathbf{k},\omega')e^{-i\omega\eta}}{\omega-\omega'+i\eta}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\rho(\mathbf{k},\omega'),\end{aligned} \tag{31.29}$$

这里对ω的积分是通过把迴路在下半平面闭合而算出的．方程（31.29）也可直接从定义［方程（31.17）］算得，

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}i\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)e^{-i\omega\eta}&=\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}i\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{x},\eta)\\&=(2s+1)^{-1}\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\\&\quad\times\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}0),\hat{\psi}^{\dagger}_{K\alpha}(0)]_{\mp}\}\\&=\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\delta(\mathbf{x})\mathrm{Tr}\hat{\rho}_G\\&=1,\end{aligned} \tag{31.30}$$

这里第三、四行是用了正则的对易关系式（2.3）得到的．将方程(31.29)和（31.30）作比较，立即给出

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\rho(\mathbf{k},\omega')=1, \tag{31.31}$$

这对玻色子和费米子两者都是正确的．这个求和定则决定了Green 函数在大$|\omega|$时的渐近性质：

$$\bar{G}^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)=\bar{G}^{\mathrm{A}}(\mathbf{k},\omega)\sim\frac{1}{\omega}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\rho(\mathbf{k},\omega')\sim\frac{1}{\omega}$$

$$|\omega| \to \infty, \tag{31.32}$$

这个式子在确立收敛性质时是有用的.

温度 Green 函数和解析延拓

在上一节中，权重函数只用以确定各种实时 Green 函数及其相互关系. 虽然这种关系式是有价值的，然而它们自身并不足以说明，我们对有限温度下的 Lehmann 表示进行广泛讨论是有理由的. 现在我们将证明一个重要的结果，就是这个权重函数也确定了温度 Green 函数$\mathcal{G}$. 用这个方法，Lehmann 表示提供了 $\mathcal{G}$ 和 $\bar{G}$ 之间的直接联系，因而在有限温度理论中起着中心的作用.

只考虑正的 τ 就足够了，这时 $\mathcal{G}$ 成为

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\mathbf{x}, \tau) &= -(2s+1)^{-1}\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_G \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}, \tau)\hat{\psi}^{\dagger}_{K\alpha}(0)] \\
&= -(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}}e^{-i\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \\
&\quad \times e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{\psi}_{\alpha}(0)e^{-\hat{K}\tau/\hbar}e^{i\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{X}/\hbar}\hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(0)] \\
&= -(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{mn}[e^{-\beta K_m}e^{i(\hat{\mathbf{P}}_n-\mathbf{P}_m)\cdot\mathbf{x}/\hbar} \\
&\quad \times e^{-(K_n-K_m)\tau/\hbar}|\langle m|\hat{\psi}_{\alpha}|n\rangle|^2].
\end{aligned} \tag{31.33}$$

相应的 Fourier 系数由下式给出[见方程 (25.14)]

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_l) &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_l\tau}\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau) \\
&= (2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{mn}\{e^{-\beta K_m}(2\pi)^3 \\
&\quad \times \delta[\mathbf{k}-\hbar^{-1}(\mathbf{P}_n-\mathbf{P}_m)]|\langle m|\hat{\psi}_{\alpha}|n\rangle|^2 \\
&\quad \times (1 \mp e^{-\beta(K_n-K_m)}) \\
&\quad \times [i\omega_l - \hbar^{-1}(K_n-K_m)]^{-1}\},
\end{aligned} \tag{31.34}$$

这里 ω_l 对于玻色子等于 $2l\pi/\beta\hbar$，对于费米子则等于 $(2l+1)\pi/\beta\hbar$. 与方程(31.19)比较立即得出重要关系

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega')}{i\omega_n - \omega'}, \qquad (31.35)$$

这表明函数 $\Gamma(\mathbf{k}, z)$ [方程 (31.22)] 确定温度 Green 函数以及 $\bar{G}^{\mathrm{R}}$ 和 $\bar{G}^{\mathrm{A}}$. 在任一实际计算中，我们首先算出 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$，因而只知道在分立的点集 $\{i\omega_n\}$ 上的 $\Gamma(\mathbf{k}, z)$. 于是需要解析延拓到整个复 z 平面. 如没有进一步的信息，这一步不可能是唯一的. 设 $\Gamma(\mathbf{k}, z)$ 是一个可能的延拓；则对于任一整数 p，函数 $e^{2\pi p z/\omega_n}\Gamma(\mathbf{k}, z)$ 是另一个可能的延拓，因为在点 $i\omega_n$ 它也成为 $\Gamma(\mathbf{k}, i\omega_n)$. 可是，在复 z 平面上其他各处，包括无限远点在内，这些延拓彼此不同. 既然求和定则[方程 (31.31)]要求随着 $|z| \to \infty$, $\Gamma(\mathbf{k}, z) \sim z^{-1}$, 这样我们就能挑选合适的解析延拓，这才保证是唯一的[1].

实际上，通常最简单的是，形式上把 $i\omega_n$ 当作连续变量而直接从 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$ 算出 $\rho(\mathbf{k}, \omega)$. 于是权重函数作为下列极限值而得到

$$\rho(\mathbf{k}, x) = i^{-1}\{\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)|_{i\omega_n = x - i\eta} - \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)|_{i\omega_n = x + i\eta}\}. \qquad (31.36)$$

因此，$\mathcal{G}(\mathbf{k}\omega_n)$ 的任何近似立即提供了相应的 $\rho(\mathbf{k}, \omega)$，从而也提供了 $\bar{G}$、$\bar{G}^{\mathrm{R}}$ 和 $\bar{G}^{\mathrm{A}}$. 作为一个特别简单的例子，考虑无相互作用的温度 Green 函数 $\mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) = [i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu)]^{-1}$. 无相互作用的权重函数 ρ^0 由下式给出，

$$\rho^0(\mathbf{k}, x) = \frac{1}{i}\left[\frac{1}{x - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) - i\eta} - \frac{1}{x - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) + i\eta}\right]$$
$$= 2\pi\delta[x - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu)], \qquad (31.37)$$

---

1) G. Baym and N. D. Mermin, *J. Math. Phys.*, **2**: 232 (1961).

对方程 (31.24) 进行一些简单代数运算，给出编时函数

$$\bar{G}^0(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{1\mp\exp[-\beta(\varepsilon_k^0-\mu)]}\frac{1}{\omega-\hbar^{-1}(\varepsilon_k^0-\mu)+i\eta}$$
$$+\frac{1}{1\mp\exp[\beta(\varepsilon_k^0-\mu)]}\frac{1}{\omega-\hbar^{-1}(\varepsilon_k^0-\mu)-i\eta}. \tag{31.38}$$

从定义 [方程 (31.1)] 和关系式 $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}\}=n_k^0=\{\exp[\beta(\varepsilon_k^0-\mu)]\mp 1\}^{-1}$ 也能直接得到方程 (31.38).

32. 有限温度下的线性响应

在第 31 节中，我们看到温度 Green 函数 $\mathcal{G}(\mathbf{k},\omega)$ 可用来确定热力学平衡系统添加或减少一个粒子所得的激发态的行为. 但是，如第五章所指出，存在许多别的种类的激发态，而最重要的是粒子数守恒的激发态. 线性响应理论为描述这种激发提供了方便的基础，我们先把前面的理论推广到有限温度.

一般理论

如果一个系统在 $t=t_0$ 受到外界哈密顿函数 $\hat{H}^{ex}(t)$ 的扰动而离开平衡态，算符 $\hat{O}$ 的任意矩阵元的第一级改变由方程 (13.9) 给出. 特别是，对角矩阵元的改变为

$$\delta\langle jN|\hat{O}(t)|jN\rangle=\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\langle jN$$
$$|[\hat{H}_H^{ex}(t'),\hat{O}_H(t)]|jN\rangle\quad(t>t_0), \tag{32.1}$$

其中下标 H 表示用完全的未微扰哈密顿函数 $\hat{H}$ 的 Heisenberg 图象，而 $|jN\rangle$ 是 $\hat{H}$ 和 $\hat{N}$ 的准确的本征态，本征值为 $E_j(N)$ 和 N. 对 $t<t_0$，系统处于热力学平衡，而不同的态 $|jN\rangle$ 的占据数

由统计算符 $\hat{\rho}_G$ 确定. 既然方程(32.1)已经正比于 $\hat{H}^{ex}$, $\hat{O}$ 的系综平均的第一级改变可从每个态 $|jN\rangle$ 的贡献带权相加而算出,这些贡献的权重是按未微扰系综来定的,

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{O}(t)\rangle_{ex} &= \sum_{jN} e^{\beta[\Omega-E_j(N)+\mu N]}\delta\langle jN|\hat{O}(t)|jN\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{H}_H^{ex}(t'),\hat{O}_H(t)]\}\ (t>t_0).\end{aligned} \tag{32.2}$$

这个方程是 $T=0$ 的方程(13.10)的直接推广.

特定地说,假定 $\hat{H}^{ex}(t)$ 取如下形式

$$\hat{H}^{ex}(t) = \int d^3x\hat{O}(\mathbf{x}t)\Xi^{ex}(\mathbf{x}t), \tag{32.3}$$

其中 $\Xi^{ex}(\mathbf{x}t)$ 是与算符密度 $\hat{O}(\mathbf{x}t)$ 耦合的广义 c 数力. $\hat{O}(\mathbf{x}t)$ 的线性响应由下式给出

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{O}(\mathbf{x}t)\rangle_{ex} &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\int d^3x' \\ &\quad\times\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{O}_H(\mathbf{x}t),\hat{O}_H(\mathbf{x}'t')]\}\Xi^{ex}(\mathbf{x}'t') \\ &= \frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\int d^3x' D^R(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t')\Xi^{ex}(\mathbf{x}'t'),\end{aligned} \tag{32.4}$$

其中 D^R 是在平衡巨正则系综中算出的推迟相关函数,

$$iD^R(\mathbf{x}t,\mathbf{x}'t') \equiv \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{O}_H(\mathbf{x}t),\hat{O}_H(\mathbf{x}'t')]\}\theta(t-t'), \tag{32.5}$$

这样,线性响应的分析归结为计算推迟相关函数.既然未微扰哈密顿函数是不含时间的, D^R 取 $D^R(\mathbf{x},\mathbf{x}',t-t')$ 形式. 此外, $\hat{O}$ 通常与 $\hat{N}$ 可对易,这就使我们可用巨正则哈密顿函数 $\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N}$ 重新解释 Heisenberg 算符:

$$\hat{O}_H(\mathbf{x}t) = e^{i\hat{K}t/\hbar}\hat{O}(\mathbf{x})e^{-i\hat{K}t/\hbar} \equiv \hat{O}_K(\mathbf{x}t). \tag{32.6}$$

Fourier 变换 $D^R(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega)$ 具有简单的 Lehmann 表示,这表明 $D^R(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega)$在区域 $\mathrm{Im}\omega>0$ 是解析的.

直接计算 D^R 是不方便的;为此引进相应的温度 Green 函数 $\mathscr{D}$,它依赖于虚时间变量 τ:

$$\mathscr{D}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \equiv -\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G T_\tau[\hat{O}_K(\mathbf{x}\tau)\hat{O}_K(\mathbf{x}'\tau')]\}. \quad (32.7)$$

这里的 Heisenberg 算符由下式给出[比较方程(24.1)]

$$\hat{O}_K(\mathbf{x}\tau) = e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{O}(\mathbf{x})e^{-\hat{K}\tau/\hbar}. \quad (32.8)$$

既然 $\mathscr{D}$ 具有形式 $\mathscr{D}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau-\tau')$，它的 Fourier 系数 $\mathscr{D}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \nu_n)$ 也有简单的 Lehmann 表示. 正像第 31 节中那样，这个表示是非常重要的，因为同样的权重函数决定 $D^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega)$ 和 $\mathscr{D}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \nu_n)$ 两者. 此外，$\mathscr{D}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \nu_n)$ 可用第 25 节的 Fyenman 规则和图解分析算出. 解析延拓到实 ω 轴的上方就使我们可以计算推迟相关函数.

密度相关函数

Lehmann 表示的精确形式取决于所涉及的具体算符. 作为一个非常有意义的例子，现在考虑粒子密度，并且将上述解析延拓详细地进行到底. 为简单起见，假定系统是均匀的，但同样的一般方法也适用于更复杂的情况. 问题中的算符是密度偏差算符

$$\tilde{n}(\mathbf{x}) = \hat{n}(\mathbf{x}) - \langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle, \quad (32.9)$$

其中 $\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle$ 是密度算符的系综平均，并且显含 T 和 μ. 推迟函数和温度函数为

$$iD^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\tilde{n}_K(\mathbf{x}t), \tilde{n}_K(\mathbf{x}'t')]\}\theta(t-t'), \quad (32.10)$$

$$\mathscr{D}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = -\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G T_\tau[\tilde{n}_K(\mathbf{x}\tau)\tilde{n}_K(\mathbf{x}'\tau')]\}, \quad (32.11)$$

并具有通常的 Fourier 表示

$$D^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = (2\pi)^{-4}\int d^3q d\omega e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \times e^{-i\omega(t-t')}D^{\mathrm{R}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (32.12)$$

$$\mathscr{D}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = (2\pi)^{-3}\int d^3q(\beta\hbar)^{-1}\sum_n e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \times e^{-i\nu_n(\tau-\tau')}\mathscr{D}(\mathbf{q}, \nu_n), \quad (32.13)$$

其中 $\nu_n = 2n\pi/\beta\hbar$ 表示偶整数. 算出这两个函数中的每一个的 Lehmann 表示是直截了当的,我们得到

$$D^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},\omega) = \hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\Delta(\mathbf{q},\omega')}{\omega-\omega'+i\eta}, \tag{32.14}$$

$$\mathscr{D}(\mathbf{q},\nu_n) = \hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\Delta(\mathbf{q},\omega')}{i\nu_n-\omega'}, \tag{32.15}$$

其中

$$\begin{aligned}\hbar\Delta(\mathbf{q},\omega) &= -\hbar\Delta(-\mathbf{q},-\omega)\\ &= e^{\beta\Omega}\sum_{lm}\{e^{-\beta K_l}(2\pi)^3\delta[\mathbf{q}-\hbar^{-1}(\mathbf{P}_m-\mathbf{P}_l)]\\ &\quad\times 2\pi\delta[\omega-\hbar^{-1}(K_m-K_l)]\\ &\quad\times(1-e^{-\beta\hbar\omega})|\langle l|\tilde{n}|m\rangle|^2.\end{aligned} \tag{32.16}$$

方程 (32.14) 和 (32.16) 共同表明, $D^{\mathrm{R}}(\mathbf{q},\omega)$是$\omega$的半纯函数, 其极点紧靠在实轴下方. 每个极点对应于通过密度算符相联系的态之间的一种可能跃迁.

假如在谱表示中已给出 $\mathscr{D}$ 的显式[方程 (32.15)], 则解析延拓将是简单的. 但是,实际上,这表示式是另一种形式,从而必须较详细地考察$\mathscr{D}$的微扰展开式.方程(32.11)可改写为

$$\begin{aligned}&\mathscr{D}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau') - \langle\hat{n}_K(\mathbf{x}\tau)\rangle\langle\hat{n}_K(\mathbf{x}'\tau')\rangle\\ &\quad= -\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G T_\tau[\phi^\dagger_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\\ &\qquad\times\hat{\phi}^\dagger_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau')\hat{\phi}_{K\beta}(\mathbf{x}'\tau')]\},\end{aligned} \tag{32.17}$$

这可以变换到相互作用图象. 步骤与第七章中的相同, 我们只叙述最后结果

$$\begin{aligned}\mathscr{D}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau') &= \langle\hat{n}_K(\mathbf{x}\tau)\rangle\langle\hat{n}_K(\mathbf{x}'\tau')\rangle\\ &\quad-\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{-1}{\hbar}\right)^l\frac{1}{l!}\int_0^{\beta\hbar}d\tau\cdots\int_0^{\beta\hbar}d\tau_l\\ &\quad\times\mathrm{Tr}\{e^{\beta(\Omega_0-\hat{K}_0)}T_\tau[\hat{K}_1(\tau_1)\cdots\hat{K}_1(\tau_l)\phi^\dagger_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\\ &\quad\times\hat{\phi}_{I\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\phi}^\dagger_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')\hat{\phi}_{I\beta}(\mathbf{x}'\tau')]\}_{\text{连接}},\end{aligned} \tag{32.18}$$

这里下标的意思是只保留连接图解.

重要的是记住，所谓连接图解是指图解中每一部分或是与点 $\mathbf{x}\tau$ 或是与点 $\mathbf{x}'\tau'$ 相连接. 这样，图 32.1 的两个图解就都是连接的. 可是,它们具有十分不同的结构，因为图 32.1 b 本身分离成两个各别的部分. 所有这种可分离贡献之和正好是 $-\langle\hat{n}_K(\mathbf{x}\tau)\rangle\langle n_K(\mathbf{x}'\tau')\rangle$ 的微扰展开式，并精确地抵消方程 (32.18) 右边的第一项. 结果 $\mathscr{D}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')$ 是由一切这样的连接图解组成，图解中的点 $\mathbf{x}\tau$ 和 $\mathbf{x}'\tau'$ 通过内线而相连. 例如,唯一的零级贡献是图 32.1 a 中给出的,而 Wick 定理应用于方程 (32.18) 给出

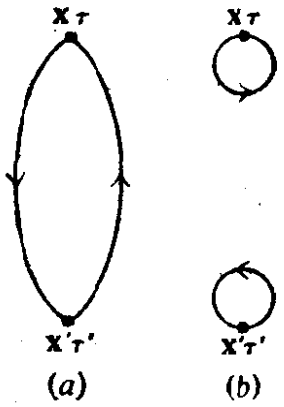


图 32.1 对 (a) $\mathscr{D}(x\tau, x'\tau')$ (b) $\langle\hat{n}_K(x\tau)\rangle\langle\hat{n}_K(x'\tau')\rangle$ 的最低级贡献.

$$\begin{aligned}\mathscr{D}^0(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') &= \mp\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')\mathscr{G}^0_{\beta\alpha}(\mathbf{x}'\tau', \mathbf{x}\tau)\\ &= \mp(2s+1)\mathscr{G}^0(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')\\ &\quad\times\mathscr{G}^0(\mathbf{x}'\tau', \mathbf{x}\tau).\end{aligned}\tag{32.19}$$

很明白，$\mathscr{D}$ 具有极化部分的结构,而且的确，$\mathscr{D}(1, 2)$ 正比于总极化 $\Pi(1, 2)$. 完全类似于引出方程 (12.14) 的论证给出

$$\mathscr{D}(1, 2) = \hbar\Pi(1, 2).\tag{32.20}$$

在任何特定的问题中，算出正规极化 Π^*，然后从 Dyson

方程定出 Π 和 $\mathscr{D}$，总是不难的．对于均匀系统，这种分析特别简单，其时 Dyson 方程的解归结为

$$\Pi(\mathbf{q}, \nu_n) = \Pi^{\star}(\mathbf{q}, \nu_n)[1 - \mathscr{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n)\Pi^{\star}(\mathbf{q}, \nu_n)]^{-1}$$
$$= \Pi^{\star}(\mathbf{q}, \nu_n)[1 - V(\mathbf{q})\Pi^{\star}(\mathbf{q}, \nu_n)]^{-1}. \quad (32.21)$$

既然 $\Pi^{\star}(\mathbf{q}, \nu_n)$ 是一个特定的极化插入图，它的 Lehmann 表示必定具有与 $\Pi(\mathbf{q}, \nu_n)$ 和 $\mathscr{D}(\mathbf{q}, \nu_n)$ 相同的形式：

$$\Pi^{\star}(\mathbf{q}, \nu_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta^{\star}(\mathbf{q}, \omega')}{i\nu_n - \omega'}, \quad (32.22)$$

其中 $\Delta^{\star}(\mathbf{q}, \omega') = -\Delta^{\star}(-\mathbf{q}, -\omega')$ 是实的．

现在我们可以完成从 $\mathscr{D}(\mathbf{q}, \nu_n)$ 到 $D^{\mathrm{R}}(\mathbf{q}, \omega)$ 的解析延拓[方程(32.14)和方程(32.15)]．为方便，引入复变量 z 的函数

$$F(\mathbf{q}, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta^{\star}(\mathbf{q}, \omega')}{z - \omega'}, \quad (32.23)$$

在一组分立值 $z = i\nu_n$，这函数成为 $\Pi^{\star}$：

$$\Pi^{\star}(\mathbf{q}, \nu_n) = F(q, i\nu_n). \quad (32.24)$$

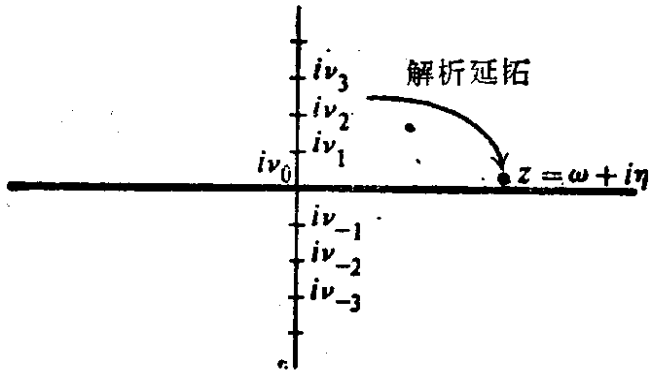


图 32.2 从 $\Pi(\mathbf{q}, \nu_n)$ 到 $\Pi^{\mathrm{R}}(\mathbf{q}, \omega + i\eta)$ 的解析延拓．

按这一方式，极化可写为

$$\Pi(\mathbf{q}, \nu_n) = \hbar^{-1}\mathscr{D}(\mathbf{q}, \nu_n)$$
$$= F(\mathbf{q}, i\nu_n)[1 - V(\mathbf{q})F(\mathbf{q}, i\nu_n)]^{-1}. \quad (32.25)$$

既然在上半和下半 z 平面两者之中，$F(\mathbf{q}, z)[1 - V(\mathbf{q}) \times$

$F(\mathbf{q}, z)]^{-1}$ 对 z 的依赖关系和解析性质都是明显的，这函数可立即向实轴 $z \to \omega + i\eta$ 延拓（见图 32.2），这里它给出相应的推迟函数

$$\begin{aligned} \Pi^{\mathrm{R}}(\mathbf{q}, \omega) &= \hbar^{-1} D^{\mathrm{R}}(\mathbf{q}, \omega) \\ &= F(\mathbf{q}, \omega + i\eta)[1 - V(\mathbf{q}) \\ &\quad \times F(\mathbf{q}, \omega + i\eta)]^{-1}. \end{aligned} \tag{32.26}$$

33. 电子气中的屏蔽

作为这个理论的一个例子，我们将研究电子气对外加标量势 $\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{x}t)$ 的响应. 外微扰与方程 (13.11) 中的相同（电子电荷是 $-e$），

$$H_H^{\mathrm{ex}}(t) = -\int d^3x \hat{n}_H(\mathbf{x}t)\, e\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{x}t), \tag{33.1}$$

这里下标 H 表示相对于 $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ 的 Heisenberg 图象，如在方程 (32.6) 中那样. 对于均匀系，波矢为 $\mathbf{q}$ 而频率为 ω 的感应电荷密度由下式给出[比较方程 (13.18)]

$$\begin{aligned} \delta\langle \hat{n}(\mathbf{q}, \omega)\rangle &= -\hbar^{-1} D^{\mathrm{R}}(\mathbf{q}, \omega) e\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{q}, \omega) \\ &= -\Pi^{\mathrm{R}}(\mathbf{q}, \omega) e\varphi^{\mathrm{ex}}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \tag{33.2}$$

既然 $F(\mathbf{q}, \omega + i\eta)$ 是 $\Pi^{*}(\mathbf{q}, \nu_n)$ 的延拓，方程 (32.26) 和 (33.2) 把热力学平衡下的系统的线性响应与有限温度理论中算出的总的正规极化联系起来.

实际上，Π^{*} 必须用挑选出的某种图解集合来近似，现在考虑最简单的选择 Π^0，它是在第30节研究过的. 方程 (30.9)、(32.22) 和 (32.23) 的比较表明 $F^0(\mathbf{q}, z)$ 为

$$F^0(\mathbf{q}, z) = -2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n^0_{\mathbf{p}}}{\hbar z - (\varepsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \varepsilon^0_{\mathbf{p}})}. \tag{33.3}$$

这样，相应的推迟函数成为

$$F^0(\mathbf{q},\omega+i\eta)$$

$$=-2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-n^0_{\mathbf{p}}}{\hbar\omega+i\eta-(\epsilon^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\epsilon^0_{\mathbf{p}})}$$

$$=-2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}n^0{}_{\mathbf{p}+\frac{1}{2}\mathbf{q}}\left[\frac{1}{\hbar\omega+i\eta-\hbar^2\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}/m}\right.$$

$$\left.-\frac{1}{\hbar\omega+i\eta+\hbar^2\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}/m}\right],\qquad(33.4)$$

这最后的形式是用简单的变量变换得到的. 这个方程对一切 T 和 μ 都适用，而且当 $T\to 0$，它清楚地重现零温度推迟函数 $\Pi^{0R}(\mathbf{q},\omega)$ [方程 (15.9)] 虽然把方程 (33.4) 完全积分出来将是十分复杂的，但是在经典极限下这表示式也变为简单的了，此时分布函数成为高斯函数 $n^0_p=e^{\beta\mu}e^{-\beta\hbar^2p^2/2m}$. 于是方程 (33.4) 可用柱坐标算出，以 $\hat{q}$ 为极轴，$\mathbf{p}=\mathbf{p}_\perp+\hat{q}p_\parallel$

$$F^0(\mathbf{q},\omega+i\eta)$$

$$=-2e^{\beta\mu}\int\frac{d^2p_\perp}{(2\pi)^2}\exp\left(-\frac{\beta p_\perp^2\hbar^2}{2m}\right)$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_\parallel}{2\pi}\exp\left[\frac{-\beta\left(p_\parallel+\frac{1}{2}q\right)^2\hbar^2}{2m}\right]$$

$$\times\left(\frac{1}{\hbar\omega+i\eta-\hbar^2p_\parallel q/m}-\frac{1}{\hbar\omega+i\eta+\hbar^2p_\parallel q/m}\right)$$

$$=-2e^{\beta\mu}\lambda^{-2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_\parallel}{2\pi}\exp\left[\frac{-\beta\left(p_\parallel+\frac{1}{2}q\right)^2\hbar^2}{2m}\right]$$

$$\times\left(\frac{1}{\hbar\omega+i\eta-\hbar^2p_\parallel q/m}-\frac{1}{\hbar\omega+i\eta+\hbar^2p_\parallel q/m}\right),\qquad(33.5)$$

其中 $\lambda=(2\pi\beta\hbar^2/m)^{\frac{1}{2}}$ 是热波长[见方程 (30.24)].

现在将方程 (33.5) 分成实部和虚部将是方便的:

$$F^0(\mathbf{q},\omega+i\eta)=F_1^0(\mathbf{q},\omega)+iF_2^0(\mathbf{q},\omega), \tag{33.6}$$

$$F_1^0(\mathbf{q},\omega)=-2e^{\beta\mu}\lambda^{-2}\mathscr{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\exp\left[\frac{-\beta\left(p+\frac{1}{2}q\right)^2\hbar^2}{2m}\right]$$

$$\times\left(\frac{1}{\hbar\omega-\hbar^2pq/m}-\frac{1}{\hbar\omega+\hbar^2pq/m}\right), \tag{33.7 a}$$

$$F_2^0(\mathbf{q},\omega)=2e^{\beta\mu}\lambda^{-2}\int_{-\infty}^{\infty}dp\exp\left[\frac{-\beta\left(p+\frac{1}{2}q\right)^2\hbar^2}{2m}\right]$$

$$\times\left[\frac{1}{2}\delta\left(\hbar\omega-\frac{\hbar^2pq}{m}\right)\right.$$

$$\left.-\frac{1}{2}\delta\left(\hbar\omega+\frac{\hbar^2pq}{m}\right)\right]. \tag{33.7 b}$$

此外，我们将用前面得到的热力学关系式[方程(30.34)]以消去化学势 μ 而用密度 n 代替. 既然 $V(\mathbf{q})F^0(\mathbf{q},\omega)$ 已是 e^2 的数量级，就允许只保留首项 $e^{\beta\mu}\approx\frac{1}{2}n\lambda^3$. 容易算出虚部 F_2^0 而求得

$$F_2^0(q,\omega)=-\frac{n\beta\omega}{q}\left(\frac{1}{2}\pi\beta m\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{\beta m\omega^2}{2q^2}-\frac{\beta\hbar^2q^2}{8m}\right)$$

$$\times\frac{\sinh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}\qquad(T\to\infty). \tag{33.8}$$

显然，F_2^0 是 ω 的奇函数，并在 $\omega=0$ 为零，这与权重函数 Δ^* 的反对称性相符合.

与此相反，实部 F_1^0 不能用初等函数表出，但是变数变换给出

$$F_1^0(q,\omega)=-\frac{n}{\hbar q}\left(\frac{1}{2}\beta m\right)^{\frac{1}{2}}\left\{\Phi\left[\left(\frac{1}{2}m\beta\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\omega}{q}+\frac{\hbar q}{2m}\right)\right]\right.$$
$$\left.-\Phi\left[\left(\frac{1}{2}m\beta\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\omega}{q}-\frac{\hbar q}{2m}\right)\right]\right\}\quad(T\to\infty),\tag{33.9}$$

其中

$$\Phi(x)=\pi^{-\frac{1}{2}}\mathscr{P}\int_{-\infty}^{\infty}dy\frac{e^{-y^2}}{x-y}\tag{33.10}$$

是等离子体色散函数的实部[1]. 如将被积函数乘以 $(x+y)/(x+y)$，结果可改写为

$$\Phi(x)=2x\pi^{-\frac{1}{2}}\mathscr{P}\int_0^{\infty}dy\frac{e^{-y^2}}{x^2-y^2},\tag{33.11}$$

这表明 $\Phi(x)$ 是奇函数. 在 x 很大时展开被积函数可得到 $\Phi(x)$的渐近形式

$$\Phi(x)\sim x^{-1}\left(1+\frac{1}{2}x^{-2}+\cdots\right)\quad(x\gg1),\tag{33.12}$$

但是，在 x 很小时的行为，则需要稍多费点劲. 方程(33.10)表明 $\Phi(0)=0$，因为这时被积函数是 y 的奇函数. 把方程(33.10) 对 x 微分并分部积分. 所得的表示式经重新整理给出

$$\Phi'(x)=2-2x\Phi(x),\tag{33.13}$$

上式的解为，

$$\Phi(x)=2e^{-x^2}\int_0^x dy\,e^{y^2}.\tag{33.14}$$

我们看到 $\Phi(x)$ 是 x 的整函数，而直接的展开给出

$$\Phi(x)\approx 2x\left(1-\frac{2}{3}x^2+\cdots\right)\quad(x\ll1).\tag{33.15}$$

---

1) 这个函数在下面这本书中已制成表格； B. D. Freid and S. D. Conte, "The Plasma Dispersion Function", Academic Press, New York, 1961.

为了明确具体，我们假定外微扰是正的点电荷，其势 $\varphi^{ex}(\mathbf{q},\omega)=4\pi Ze q^{-2}2\pi\delta(\omega)$. 因此只需要 $D^R(\mathbf{q},\omega)$ 的零频率分量；方程 (32.26)、(33.2)、(33.8) 和 (33.9) 的结合给出感应电荷密度

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle &= -e\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle \\ &= Ze\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\frac{V(q)F_1^0(q,0)}{1-V(q)F_1^0(q,0)}, \\ &= -Ze\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\frac{q_D^2 g_1(q\lambda)}{q^2+q_D^2 g_1(q\lambda)}. \qquad (33.16)\end{aligned}$$

这里 $q_D=(4\pi ne^2\beta)^{\frac{1}{2}}$ 是 Debye 屏蔽长度的倒数，而 $\lambda=(2\pi\hbar^2\beta/m)^{\frac{1}{2}}$ 是热波长[见方程(30.39)和(30.24)]. 这里函数 $g_1(y)$ 由下式给出

$$g_1(y)=2\pi^{\frac{1}{2}}y^{-1}\Phi\left(\frac{y}{4\pi^{\frac{1}{2}}}\right), \qquad (33.17)$$

并有下面的极限行为

$$g_1(y)\approx 1+O(y^2) \quad (y\ll 1), \qquad (33.18)$$

$$g_1(y)\sim 8\pi y^{-2} \quad (y\gg 1). \qquad (33.19)$$

方程 (33.16) 清楚地类似于方程 (14.14)，因而同样的一些评论大都能适用.

1. 总的感应电荷是

$$\delta Q=\int d^3x\,\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle=-Ze, \qquad (33.20)$$

因而，在远距离处，杂质完全被屏蔽.

2. 随着 $q\to\infty$，被积函数像 q^{-4} 那样趋于零，这保证 $\delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle$ 处处有界，包括在 $x=0$.

3. 在小 q^2 的奇异的 q^{-2} 依赖关系截断于 Debye 屏蔽长度倒数 $q_D=(4\pi ne^2\beta)^{\frac{1}{2}}$，这证明，在方程 (30.28) 中用截止波矢 $q_{\min}\propto e$ 是合理的. 既然 $g_1(q\lambda)$ 是 $q\lambda$ 的整函数，因而

它在整个复 q 平面上是无限次可微的. 因此 $\delta\langle\hat{\rho}(x)\rangle$ 的渐近行为可用近似 $g_1(q\lambda)\approx g_1(0)=1$ 得到,因为所略去的项的数量级为 $(q_D\lambda)^2\propto(ne^2\beta)(\hbar^2\beta/m)=(n^{\frac{1}{3}}e^2\beta)(\hbar^2n^{\frac{2}{3}}\beta/m)\ll 1$ [见方程 (30.48) 后面的讨论]:

$$\delta\langle\hat{\rho}(x)\rangle\sim -Ze\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}q_D^2}{q^2+q_D^2}$$
$$=-Zeq_D^2(4\pi x)^{-1}e^{-q_Dx}\quad(x\to\infty).\qquad(33.21)$$

这个表示式表明 q_D^{-1} 作为经典屏蔽长度所起的作用，而且这表式等同于描述带负电的杂质的方程 (30.41b). 在零温度下，尖锐分明的 Fermi 面引入附加的占优势的振荡项，修改了渐近电荷密度 [方程 (14.26)]; 但在这里的经典极限下,并不出现这样的行为,因为分布函数是光滑的.

34. 电子气中的等离子体振荡

这里的理论也可用以研究热力学平衡系统的集体振荡，我们现在考察电子气中的等离子振荡. 如果系统受到一个脉冲式微扰 $\varphi^{ex}(\mathbf{x}t)=\varphi_0e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\delta(t)$，与此相联系的感应密度为 [比较方程 (15.7)]

$$\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle=-e\varphi_0e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}$$
$$\times\frac{F_1(q,\omega)+iF_2(q,\omega)}{1-V(q)F_1(q,\omega)-iV(q)F_2(q,\omega)},\qquad(34.1)$$

这里 $F(\mathbf{q},\omega+i\eta)$ 已分为实部和虚部，像在方程 (33.6) 中那样. 自然的振荡频率由推迟密度相关函数的极点确定，它出现在方程

$$1-V(q)F_1(q,\Omega_q-i\gamma_q)-iV(q)F_2(q,\Omega_q-i\gamma_q)=0\qquad(34.2)$$

的解 $\Omega_q - i\gamma_q$ 中.

这个描述是完全一般的. 如果准确的正规极化 $\Pi^*(q, \nu_n)$ 用零级极化 $\Pi^0(q, \nu_n)$ 近似,就得到方程(15.10)在有限温度下的推广. 在经典极限下,理论变得特别简单,这时以前关于 F_1^0 和 F_2^0 的表示式是适用的. 此外, 我们还假定阻尼是很小的,因此方程 (34.2) 的实部和虚部成为

$$1 = V(q)F_1^0(q, \Omega_q), \tag{34.3}$$

$$\gamma_q = F_2^0(q, \Omega_q)\left[\frac{\partial F_1^0(q, \omega)}{\partial \omega}\bigg|_{\Omega_q}\right]^{-1}. \tag{34.4}$$

下面将表明: 对于 $q \ll q_D$, 这是一个好的近似,这时有可能用方程 (33.12) 给出的渐近形式算出 F_1^0. 直截了当的计算给出

$$F_1^0(q, \omega) \approx \frac{nq^2}{m\omega^2}\left(1 + \frac{3q^2}{\beta m\omega^2} + \cdots\right) \quad (q \to 0). \tag{34.5}$$

方程 (34.3) 于是成为

$$1 = \frac{4\pi ne^2}{m\Omega_q^2}\left(1 + \frac{3q^2}{\beta m\Omega_q^2}\right), \tag{34.6}$$

它具有近似解

$$\Omega_q = \pm\Omega_{pl}\left[1 + \frac{3}{2}\left(\frac{q}{q_D}\right)^2\right], \tag{34.7}$$

这里 Ω_{pl} 和 q_D 由方程(15.18)和(30.39)给出. 这集体模又是等离子体振荡,而色散关系具有与 $T = 0$ 的相同的形式[比较方程 (15.17)].

但是, 有限温度引进了一个新特点, 因为甚至在只保留 Π^0 的最低级近似下,这些集体模现在也被阻尼. 既然高温下 $\beta\hbar\Omega_{pl} = O(q_D\lambda) \ll 1$, 方程 (33.8) 可用

$$F_2^0(q, \omega) \approx -\frac{n\beta\omega}{q}\left(\frac{1}{2}\pi\beta m\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{\beta m\omega^2}{2q^2}\right) \quad (q \ll q_D) \tag{34.8}$$

来近似. 方程 (34.5) 的导数与方程 (34.4) 和 (34.8) 相结合，可以给出

$$\gamma_q = F_2^0(q, \pm\Omega_{pl})\left[\frac{\partial F_1^0(q,\omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\omega=\pm\Omega_{pl}}\right]^{-1}$$

$$= q^{-3}\Omega_{pl}^4(m\beta)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{8}\pi\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{\Omega_{pl}^2 m\beta}{2q^2}\right)$$

$$= \Omega_{pl}\left(\frac{1}{8}\pi\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{q_D}{q}\right)^3\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q_D}{q}\right)^2\right]. \qquad (34.9)$$

正如从一般考虑所预计的那样，γ_q 是正的，而且 D^R 的两个极点都位于下半平面，在点 $\omega \approx \pm\Omega_{pl} - i\gamma_q$. 在长波下，小阻尼近似被证明为充分正当，因为 $|\gamma_q/\Omega_q|$ 指数式地趋于零. 由于 Landau 首先注意到方程(34.2)的解是复数而不是实数，所以弱阻尼通常称作 Laudau 阻尼[1]. 有意义的是，温度对阻尼和色散关系的 q^2 改正两者都有影响，但并不改变等离子体的基频.

习　　题

9.1　如 $E_0(N)$ 是N个粒子的 Fermi 系统的基态能量，试证明，低温下的巨配分函数可近似写为 $e^{-\beta\Omega}\approx e^{-\beta[E_0(N_0)-\mu N_0]}\times[2\pi/\beta E_0''(N_0)]^{\frac{1}{2}}$，其中 $N_0(\mu)$用关系式 $E_0'(N_0)=\mu$ 定义，而撇号表示对N的微分.为什么可以认为 N_0 是平均粒子数?在同一近似下算出方程 (31.12)，并证明 $\bar{G}(\mathbf{k}, \omega-\mu/\hbar)_{T=0}=G(\mathbf{k},\omega)$，这里$G$是第三章中的零温度函数.

9.2　试计算方程 (27.8) 的 Hartree-Fock Green 函数的权重函数. 并求出相应的实时 Green 函数 $\bar{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega)$ 和推迟以及超前 Green 函数.

---

1) L. D. Laudau *J. Phys. (USSR)* **10**:25 (1946).

9.3 (a) 如果方程(26.5)中的正规自能 $\Sigma^{\star}(\mathbf{k}, \omega_n)$ 的形式为

$$\Sigma^{\star}(\mathbf{k}, \omega_n) = \Sigma_0(\mathbf{k}) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\sigma(\mathbf{k}, \omega')}{i\omega_n - \omega'},$$

其中 Σ_0 和 σ 是实的，用定义 $\Sigma_1^{\star}(\mathbf{k},\omega) + i\Sigma_2^{\star}(\mathbf{k},\omega) \equiv \Sigma^{\star}(\mathbf{k}, \omega_n)|_{i\omega_n=\omega-i\eta}$ 求方程(31.35)中的相应权重函数 $\rho(\mathbf{k}, \omega)$.

(b) 在自洽方程 $\hbar\omega_k = \varepsilon_k^0 - \mu + \hbar\Sigma_1^*(\mathbf{k}, \omega_k)$ 确定的点 $\omega = \omega_k$ 的邻域，将权重函数 $\rho(\mathbf{k}, \omega)$ 展开，并且推导近似的准粒子(洛仑兹)权重函数.计算近似的 $\bar{G}_{qp}(\mathbf{k}, \omega)$，并证明单粒子激发的激发能和阻尼由 $\varepsilon_k = \hbar\omega_k + \mu$ 和 $\gamma_k = \{1 - \partial\Sigma_1^{\star}(\mathbf{k}, \omega)/\partial\omega|_{\omega_k}\}^{-1}\Sigma_2^{\star}(\mathbf{k}, \omega_k)$ 给出(比较习题 3.14).

9.4 对有限温度下的推迟密度相关函数 $iD^{\mathrm{R}}(x, x') = \theta(t - t')\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\tilde{n}_H(x), \tilde{n}_H(x')]\}$ 重作习题 5.1. 考虑下列同时极限:

(a) 低温 ($k_BT \ll \varepsilon_F$) 且 $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \gg k_F^{-1}$,

(b) 经典极限且 $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \gg \lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T}\right)^{\frac{1}{2}}$.

与第 14 节末尾的讨论比较.

9.5 用自旋密度算符 $\hat{\sigma}_z(\mathbf{x}) = \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})(\sigma_z)_{\alpha\beta}\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x})$ 构成推迟相关函数

$$iD_\sigma^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{\sigma}_{Hz}(\mathbf{x}t), \hat{\sigma}_{Hz}(\mathbf{x}'t')]\}\theta(t - t')$$

以及相应的温度 Green 函数

$$\mathscr{D}_\sigma(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = -\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_G T_\tau[\hat{\sigma}_{Kz}(\mathbf{x}\tau)\hat{\sigma}(\mathbf{x}'\tau')]\}.$$

试推导这两个函数的 Lehmann 表示，并且证明它们像在方程(32.14)和(32.15)中那样通过谱的权重函数相联系.

9.6 试研究一个均匀的自旋为 1/2 的 Fermi 系统对弱的外磁场 $\mathscr{H}(\mathbf{x}t)$ 的线性响应，这里微扰哈密顿函数由

$$\hat{H}^{\mathrm{ex}} = -\mu_0 \int d^3x \hat{\sigma}_z(\mathbf{x})\mathscr{H}(\mathbf{x}t)$$

给出.

(a) 证明感应磁化强度由下式给出

$$\langle \hat{M}_z(\mathbf{x}t)\rangle = -\mu_0^2\hbar^{-1}\int d^3x'\,dt'\,D_\sigma^{\mathrm{R}}(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t')\mathscr{H}(\mathbf{x}'t'),$$

$$\langle \hat{M}_z(\mathbf{k},\omega)\rangle = -\mu_0^2\hbar^{-1}D_\sigma^{\mathrm{R}}(\mathbf{k},\omega)\mathscr{H}(\mathbf{k},\omega),$$

其中 D_σ^{R} 的定义见习题 9.5.

(b) 对无相互作用系统用 Wick 定理算出 $\mathscr{D}_\sigma$，并用习题 9.5 的结果定出 D_σ^{R}.

(c) 试求无相互作用系统在静磁场中的广义磁化率 $\chi(\mathbf{k},0)=\langle \hat{M}_z(\mathbf{k},0)\rangle/\mathscr{H}(\mathbf{k},0)$，并验证

$$\lim_{k\to 0}\chi(\mathbf{k},0)=\begin{cases}\dfrac{3\mu_0^2 n}{2\epsilon_F^0} & (T=0)\ \text{Pauli 自旋顺磁性},\\[2ex] \dfrac{\mu_0^2 n}{k_B T} & (T\to\infty)\ \text{居里定律}.\end{cases}$$

9.7 在零温度理论中重作习题 9.6 的计算. 为什么这里的零温度计算行得通，而习题 7.5 中的却失败了?

9.8 (a) 用习题 5.9 和 9.6 证明，对于自旋为 1/2 且势与自旋无关的 Fermi 系，其静磁化率准确地由 $\chi(\mathbf{k},0)=-\mu_0^2\Pi^{\star}(\mathbf{k},0)=-\mu_0^2\Pi^{\star}(\mathbf{k},0)$ 给出.

(b) 用习题 5.8 所用的近似，试推导稀薄的自旋 1/2 刚球型 Fermi 气体的零温度磁化率 $\chi/\chi_p=(1-2k_Fa/\pi)^{-1}$，其中 χ_p 是 Pauli 磁化率. 与习题 4.10 比较.

9.9 试讨论在低的但有限的温度下，稠密电子气体中杂质周围的屏蔽电子云的渐近形式. 从而验证第 14 节末尾的讨论.

9.10 试证明，在一切温度下，等离子体色散关系的环形近似，到数量级 $\mathbf{q}^2$，可写为 $\Omega_q^2=\Omega_{pl}^2+\mathbf{q}^2\langle v^2\rangle$，其中 $\langle v^2\rangle$ 是在温度 T 的无相互作用 Fermi 气体中粒子的均方速度. 验

证这个方程重现方程 (15.17) 和 (34.7). 求出对方程(15.17)的第一级低温改正. 对非凝聚玻色子重作本题.

9.11 对一切 T 和 μ 算出 $F_2^0(q, \omega)$ [方程 (33.4) 和 (33.6)], 并且重新推导方程 (12.41)、(12.43)、(12.45) 和 (33.8). 试求低温下等离子体振荡和零声的阻尼. 在经典极限下, 零声将会遇到什么?

9.12 试用环形近似 $\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n) = \Sigma^*_{(1)}(\mathbf{k}) + \Sigma^*_r(\mathbf{k}, \omega_n)$ 研究在零温度下稠密电子气体中的单粒子激发, Σ^*_r 取自方程 (30.12).

(a) 试证明, 到数量级 r_s, 激发谱(见习题 9.3 b) 为

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon^0_{\mathbf{k}} - \varepsilon^0_F \frac{\alpha r_s}{\pi^2}\int d^3q \frac{\theta(1 - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{\mathbf{q}^2 + 2\alpha r_s f\left(\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{k} + \frac{1}{2}q\right)},$$

其中 $\alpha = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}}$, f 是方程(12.58)所定义的, 而 $\mathbf{K} = \mathbf{k}/k_F$[1]. 从而定出有效质量 m^* (见习题 8.2 b).

(b) 试证明, 紧靠 Fermi 面的阻尼常数 (习题 9.3 b) 由 $\hbar\gamma_k \approx \varepsilon^0_F(\alpha r_s)^{\frac{1}{2}}(\pi^{\frac{3}{2}}/16)(k/k_F - 1)^2$ 给出.

---

1) 习题 9.12 a 和 9.12 b 的结果是由 J. J. Quinn 和 R. A. Ferrell 推得的, 见 *Phys. Rev.*, **112**: 812 (1958).

第四部分　正 则 变 换

第十章　正 则 变 换

在以前各章中，关于相互作用多粒子系集的讨论，强调了量子场论和 Green 函数的用途．可是，对于许多系统，用一种比较直接的方法，可使其中的物理内容变得较为清晰，在这方法中，把原来的二次量子化哈密顿函数加以简化，从而得出一个可以严格求解的近似问题．本章将研究这样一类问题，它们可用抽象占据数，Hilbert 空间中的产生和消灭算符的正则变换解出．如第一章已注意到的，对易关系完全表明了产生和消灭算符的特性．既然按定义正则变换并不改变这些对易关系，则在玻色子的情况下，变换后的算符仍然满足方程(1.28)，而在费米子的情况下仍然满足方程(1.50)和(1.51)．作为第一个例子，我们考虑相互作用的 Bose 气体(第 35 节)，这采用了 Bogoliubov 的处理方法[1]，然后研究相互作用 Fermi 气体(第 36 节和 37 节)．

35. 相互作用 Bose 气体

零温度下的相互作用 Bose 气体，前面已在量子场论的框架之内加以考虑（第六章）．这里实质上是处理同一个问题，以此作为一种模型哈密顿函数的例子，这种模型哈密顿函数

1) N. N. Bogoliubov, *J. Phys.* (*USSR*), **11**:23 (1947).

可以严格对角化，从而以直接而直观的方式给出第 22 节的所有物理结果.如果系集是稀薄的，则大多数粒子占据动量为零的态，只有动量转移很小的两体碰撞才起重要作用. 在第 11 和 22 节已经看到，这种碰撞的特征是单一的参数 a，即 s 波散射长度. 基于这个理由，我们引入模型哈密顿函数，它由动能项和人为的势能项组成

$$\hat{H}=\sum_{\mathbf{k}}\hbar\omega_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}+\frac{g}{2V}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}a_{\mathbf{k}_1}^{\dagger}a_{\mathbf{k}_2}^{\dagger}a_{\mathbf{k}_3}a_{\mathbf{k}_4}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4},\tag{35.1}$$

其中把真实的势 $V(\mathbf{k})$ 换成了赝势 g.

要求 $\hat{H}$ 正确地重现真空中的两体散射性质，就可以决定常数矩阵元 g. 这个问题已在第 11 节研究过，那里已证明散射振幅按照方程 (11.14) 而联系于两体势.在这里，把 Fourier 变换式 $v(\mathbf{k})=mV(\mathbf{k})/\hbar^2$ 换成 $mg/\hbar^2$，我们就求得

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\mathbf{k}',\mathbf{k})&=-4\pi f(\mathbf{k},\mathbf{k}')\\&=\frac{mg}{\hbar^2}+\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{(mg/\hbar^2)^2}{k^2-q^2+i\eta}+\cdots.\end{aligned}\tag{35.2}$$

对于长波，左边成为 $4\pi a$，这给出关系式

$$\frac{4\pi a\hbar^2}{m}=g-\frac{mg^2}{\hbar^2}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{q^2}+\cdots.\tag{35.3}$$

第一级的结果

$$g=\frac{4\pi\hbar^2a}{m}\tag{35.4}$$

具有确定的意义. 与此相反，第二级的积分在动量增大时发散. 这个人为的发散性起源于用 g 取代 $V(\mathbf{k})$，因此，我们在某个大的波矢 Q 把积分截断.在下面的讨论中将证明，基态能量也有类似的发散性，然而可以把这两个表示式合在一起，给出有限的解答，即使 $Q\to\infty$ 也行. 本节末尾还要回到这个问题.

计算散射的各种性质必须小心，因为 s 波散射长度 a 是按照粒子似乎可以互相区分来定义的. 对于全同玻色子，总的波函数是对称的，微分散射截面是从对称化的散射振幅

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \tag{35.5}$$

得出的. 在低能极限，每一项成为 $-a$，这给出

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \to |2a|^2 \qquad (k \to 0), \tag{35.6}$$

它是可区分粒子的微分散射截面的四倍.

参数 g 现在已经与可观测的量有联系了，我们回到原来的多粒子哈密顿函数，即方程 (35.1). 鉴于零动量态的特殊作用，再次很自然地把算符 a_0 和 $a_0^\dagger$ 换成 c 数

$$a_0, a_0^\dagger \to N_0^{1/2}, \tag{35.7}$$

就像在第 18 节中那样. 相互作用哈密顿函数中的各项，可按 a_0 和 $a_0^\dagger$ 出现的次数来分类，我们只保留 N_0^2 和 N_0 数量级的项，

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx g(2V)^{-1}\left\{a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0 + \sum_{\mathbf{k}}{}' [2(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0^\dagger a_0 + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} a_0^\dagger a_0) + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_0 + a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}]\right\}, \tag{35.8}$$

其中求和号上加撇，意思是说要略去 $\mathbf{k} = 0$ 的项. 这个截断了的哈密顿函数明显地忽略了凝聚态以外的粒子的相互作用；只要 $N - N_0 \ll N$，它就是一个好的近似. 这个假设是否合理，下面将加以检验. 不过，看来可信的是，略去的项只能在微扰论的第三级或更高级对能量作出贡献，因为它们包含一次碰撞把粒子逐出凝聚态，第二次碰撞发生在凝聚态上方碰撞，第三次碰撞又使粒子回到凝聚态 [见方程 (11.22) 后的讨论]. 方程 (35.7) 和 (35.8) 相结合给出

$$\hat{H}_{\text{int}} = g(2V)^{-1}\left[N_0^2 + 2N_0\sum_{\mathbf{k}}{}'(a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}) + N_0\sum_{\mathbf{k}}{}'(a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + a_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k}})\right], \tag{35.9}$$

而粒子数算符成为

$$\hat{N} = N_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}{}'(a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}). \tag{35.10}$$

第 18 节中的粒子数不守恒问题，显然在这里也会出现。虽然可以引入化学势(习题 10.3)，最好还是把 $N = \langle\hat{N}\rangle$ 当作给定的而把 N_0 消去. 如果只保留数量级为 N^2 和 N 的项，把方程(35.10)代入(35.9)就给出最终的模型哈密顿函数

$$\hat{H} = \frac{1}{2}Vgn^2 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}{}'[(\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + ng)(a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}) + ng(a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + a_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k}})], \tag{35.11}$$

这里 $n = N/V$ 是粒子密度. 得出这个结果的过程中，在 $N - N_0 \ll N$ 的假定下，$\left(\sum_{\mathbf{k}}{}'a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}\right)^2$ 之类的项又被略去了. 方程(35.11)的重要特征是它可以严格解出，因为它是算符的二次型，因而可用正则变换加以对角化.

实现 $\hat{H}$ 对角化的最简单办法是定义一组新的产生和消灭算符[1]

$$a_{\mathbf{k}} = u_k\alpha_{\mathbf{k}} - v_k\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, \qquad a_{\mathbf{k}}^{\dagger} = u_k\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} - v_k\alpha_{-\mathbf{k}}, \tag{35.12}$$

这里系数 u_k 和 v_k 假定为实的，且为球对称的. 变换是正则的，如果新的算符也遵从正则对易关系

$$[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}] = [\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \alpha_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = 0, \tag{35.13}$$

容易看出，这个条件可以满足，只要施加如下的限制，对每

---

1) 虽然这一步骤通常叫作 Bogoliubov 变换，但 T. Holstein 和 H. Primakoff 在磁性系统的研究中更早地用到这种变换，见 *Phys. Rev.*, **58**: 1098 (1940).

个 $\mathbf{k}$，要求，

$$u_k^2 - v_k^2 = 1. \tag{35.14}$$

方程 (35.12) 可直接代入 $\hat{H}$，我们求得

$$\begin{aligned}\hat{H} = {} & \frac{1}{2} Vgn^2 + \sum_{\mathbf{k}}{}' [(\varepsilon_k^0 + ng)v_k^2 - ngu_k v_k] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}{}' \{[(\varepsilon_k^0 + ng)(u_k^2 + v_k^2) - 2u_k v_k ng] \\ & \times (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}})\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}{}' \{[ng(u_k^2 + v_k^2) - 2u_k v_k(\varepsilon_k^0 + ng)] \\ & \times (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}})\}. \end{aligned} \tag{35.15}$$

虽然参数 u_k 和 v_k 受到方程 (35.14) 的限制，它们的比值仍是任意的，这可用以简化方程 (35.15)．特定地说，我们将选定 u_k 和 v_k 以消去 $\hat{H}$ 的最后两行．于是，所得的哈密顿函数用准粒子数算符 $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}$ 表出显然是对角的，这使得我们可以确定它的所有本征矢量和本征值．施加于参数 $u_{\mathbf{k}}$ 和 $v_{\mathbf{k}}$ 的条件成为

$$ng(u_k^2 + v_k^2) = 2u_k v_k(\varepsilon_k^0 + ng). \tag{35.16}$$

约束条件 (35.14) 可用下列参数表示式体现，

$$u_k = \cosh\varphi_k, \qquad v_k = \sinh\varphi_k,$$

这使方程 (35.16) 成为

$$\tanh 2\varphi_k = \frac{ng}{\varepsilon_k^0 + ng}.$$

既然左边是在 -1 和 $+1$ 之间，只有当势是排斥势之时 ($g > 0$)，这方程才可能对一切 $\mathbf{k}$ 解出．用标准的双曲线函数恒等式可得

$$v_k^2 = u_k^2 - 1 = \frac{1}{2}[E_k^{-1}(\varepsilon_k^0 + ng) - 1], \tag{35.17}$$

这里

$$E_k \equiv [(\varepsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2]^{\frac{1}{2}}. \tag{35.18}$$

方程(35.14)到(35.18)相结合,就给出

$$\hat{H} = \frac{1}{2} Vgn^2 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}{}' (\varepsilon_k^0 + ng - E_k) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}{}' E_k (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}}). \tag{35.19}$$

算符 $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}$ 具有本征值 0, 1, 2, …. 因而 $\hat{H}$ 的基态 $|\mathbf{O}\rangle$ 决定于条件

$$\alpha_{\mathbf{k}} |\mathbf{O}\rangle = 0 \quad (\text{所有 } k \neq 0), \tag{35.20}$$

且可解释为准粒子真空. 注意 $|\mathbf{O}\rangle$ 是未微扰本征态的复杂组合,因为 $a_{\mathbf{k}}$ 或 $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ 都不能使 $|\mathbf{O}\rangle$ 消灭. 于是,基态能量由下式给出

$$E = \langle \mathbf{O} | \hat{H} | \mathbf{O} \rangle = \frac{1}{2} Vn^2 g + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}{}' (E_k - \varepsilon_k^0 - ng). \tag{35.21}$$

此外,所有的激发态对应于各种数目的无相互作用玻色子,它们各具有激发能 E_k. 这个能谱的形式同于第 22 节所得出的稀薄的刚性核 Bose 气体的能谱:

$$E_k \approx \begin{cases} \left(\frac{ng}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \hbar k = \left(\frac{4\pi a n \hbar^2}{m^2}\right)^{\frac{1}{2}} \hbar k & (k \to 0), \quad (35.22\,\text{a}) \\ \varepsilon_k^0 + \frac{4\pi a n \hbar^2}{m} & (k \to \infty). \quad (35.22\,\text{b}) \end{cases}$$

在长的波长,相互作用谱是波速为 $(4\pi a n \hbar^2/m^2)^{\frac{1}{2}}$ 的声波的特征. 这又是很明白的: 只有对于排斥作用 ($g > 0$, $a > 0$), 这些结果才有意义.

基态的分布函数由下式给出

$$n_k = \langle \mathbf{O} | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} | \mathbf{O} \rangle = v_k^2 \langle \mathbf{O} | \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger | \mathbf{O} \rangle = v_k^2, \tag{35.23}$$

于 $k \to 0$, 上式按 k^{-1} 变化. 对于大的波数, $v_k^2 \propto k^{-4}$, 从而保证了脱离凝聚态的粒子总数保持有限. 我们看到, 相互作用使粒子从零动量的凝聚态移出来; 确实如此,找到具有任意

高动量的粒子的有限的概率是存在的．求出下式所定义的耗尽度是有意义的．

$$\frac{N-N_0}{N}=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}{}'v_k^2=\frac{1}{n}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}v_k^2$$
$$=4\left(\frac{2na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty y^2dy\left[\frac{y^2+1}{(y^4+2y^2)^{\frac{1}{2}}}-1\right]$$
$$=\frac{8}{3}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}},\qquad(35.24)$$

定义与方程(22.14)完全一致．注意这个表示式对于 a(或 g) 是非解析的，因而不能用有限级的微扰论求得．

基态能量已在方程 (35.21) 中求出，但是，当 $k\to\infty$，所得的和按 $\sum_{\mathbf{k}}{}'k^{-2}$ 发散．这发散性反映了微扰论对 Bose 气体失效．事实上，如果用我们的赝势算出基态能量的第二级项，答案恰以同一方式发散(见习题 1.3)．这样，这发散性不是很基本的，因为它起源于这样一个假定：势作为相对动量的函数，具有常数矩阵元．较为实际的势的 Fourier 变换式则在高的动量迅速减小，这使所得的表示式收敛．不过，这一步骤并不必要，因为在方程 (35.3) 中，散射长度 a 展开到数量级 g^2 的展开式，包含着完全同样的发散性．因此，我们可以把 g 完全消去，这给出用直接测量的量 a [见方程 (35.6)] 表示基态能量的一个收敛式子[1]．为验证这个论断，加上并减去第二级能量移动以改写方程 (35.21)，．

$$E=\frac{1}{2}Vn^2g-\frac{1}{2}(ng)^2\sum_{\mathbf{k}}{}'\frac{1}{\hbar^2k^2/m}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}{}'\left(E_k-\epsilon_k^0-ng+\frac{mn^2g^2}{\hbar^2k^2}\right).$$

1) 这是 K. A. Brueckner 和 K. Sawada 注意到的，见 *Phys. Rev.*, **106**: 1117 (1957).

容易看出，最后一项收敛；还有，前两项恰好是散射长度 a 的展开式 (35.3) 中的头两项. 这样，我们得到

$$\begin{aligned}\frac{E}{N} &= \frac{1}{2}n\left(g - \frac{mg^2}{\hbar^2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{k^2}\right)\\ &\quad + \frac{1}{2}g\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(\frac{E_k}{ng} - \frac{\varepsilon_k^0}{ng} - 1 + \frac{ng}{2\varepsilon_k^0}\right)\\ &= \frac{2\pi a\hbar^2 n}{m}\left\{1 + 8\left(\frac{2na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right.\\ &\quad \left.\times\int_0^\infty y^2dy\left[(y^4+2y^2)^{\frac{1}{2}} - y^2 - 1 + \frac{1}{2y^2}\right]\right\}\\ &= \frac{2\pi a\hbar^2 n}{m}\left[1 + \frac{128}{15}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right],\end{aligned} \tag{35.25}$$

这一丝不差地就是方程 (22.19). 注意这两种计算很不相同，因为在第 22 节中计算 $E - \frac{1}{2}\mu N$，这里则直接计算 E.

可以研究一下方程 (35.25) 所略去的项的典型大小. 首先考虑凝聚态之外的粒子的相互作用. 作为对这种贡献的估计，我们把作用强度乘以粒子对偶的数目：

$$\begin{aligned}\frac{g}{2V}\frac{1}{2}(N - N_0)^2 &= \frac{1}{4}ngN\left[\frac{8}{3}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2\\ &= N\frac{2\pi\hbar^2 an}{m}\frac{1}{2}\left[\frac{8}{3}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2,\end{aligned}$$

这表明，这些项是 E/N 的高级改正项. 在方程 (35.11) 中还有另一个近似，即置换

$$\frac{gN_0^2}{2V} \to \frac{gN^2}{2V} - \frac{gN(N - N_0)}{V}.$$

这表示式略去了数量级为

$$\frac{g}{2V}(N - N_0)^2 = N\frac{2\pi\hbar^2 an}{m}\left[\frac{8}{3}\left(\frac{na^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2$$

的项，这些项在我们的近似中又是可忽略的. 最后，评论一下

用方程(35.3)消去 g 而代之以 a 这件事.能量的首项的形式是

$$\frac{E}{N}=\frac{gN}{2V}+\cdots, \tag{35.26}$$

这可用方程 (35.4) 改写为

$$\frac{E}{N}=\frac{2\pi\hbar^2 na}{m}+\cdots. \tag{35.27}$$

这一项可与稀薄 Fermi 气体的下述第一级改正项 [方程 (11.26)] 比较,

$$\begin{aligned}\frac{E}{N}-\frac{3}{5}\epsilon_F^0&=\frac{2}{3\pi}k_F a\,\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\\&=\frac{\pi\hbar^2 an}{m}(2-1),\end{aligned} \tag{35.28}$$

其中数字因子 (2 − 1) 分别来自直接项和交换项. 除了简并度因子的不同,方程 (35.27) 和 (35.28) 是全同的,两者都可用一个光频势来解释 [见方程 (11.26) 的讨论]. 对方程(35.26)作改正,需要方程(35.3)的第二级项以及方程 (35.21)的附加项. 不过,一旦消除了发散性,就允许在余下的改正项中置 $g=4\pi a\hbar^2/m$. 既然答案具有确定的意义,这最后一步的近似所引进的误差是高级的误差,从而在这里的处理中是可忽略的.

关于基态能量和凝聚态耗尽度的上述结果,重现第 22 节用量子场论方法得到的结果. 虽然正则变换提供了基态和激发态的更为现实的物理图象,它并不适于高级项的计算. 在原则上,当然,可以保留相互作用哈密顿函数(35.8)的所有高级项;于是,这两条途经必然导致全同的结果,这是因为它们是以同一的物理近似作为基础的. 不过,实际的计算一般还是凭借第六章引进的较为系统的 Green 函数方法[1].

1) 参看例如 S. T. Beliaev, *Sov. Phys. -JETP*, **7**:299 (1958).

36. Cooper 对 偶

虽然超导电体最值得注意的性质是与电磁场有关的性质(见第十三章),但超导电体也展示令人惊异的热力学效应,这些效应在微观理论的发展中起着中心的作用. 在低温下,电子比热 C_{el} 按指数律变化,

$$C_{el}\propto \exp\left(-\frac{\Delta}{k_BT}\right) \quad (T\to 0), \tag{36.1}$$

这是能隙 Δ 把基态和激发态隔开的系集的典型情况. 第二个重要的实验事实是同位素效应,同一元素的各种同位素的转变温度 T_c 按照规律

$$T_c\propto M^{-\frac{1}{2}} \tag{36.2}$$

随着离子质量 M 变化. 这个结果指出,离子实的动力学对超导态有影响,尽管在正常态中,离子并不那么特别重要(第 3 节).

本节研究 Cooper 的一个简单模型[1],它表明,Fermi 海里的两个费米子之间的吸引作用导致束缚对偶的出现.这样,无相互作用的基态(填满的 Fermi 海)相对于对偶的形成是不稳定的,而对偶的结合能是有限的,这就可以定性地说明激发谱中的间隙. 不过,还必须先证明电子之间的有效相互作用是吸引的,才能认为 Cooper 模型切合超导电性. 而在这里,同位素效应提供一条重要线索. 虽然第 12 和 14 节的屏蔽库仑势是排斥的,但另外还存在一种虚的电子-电子作用,这来自交换声子,而声子是与晶格有关的. 如 Fröhlich 首先注意到[2],对于靠近 Fermi 面的电子,这种作用是吸引的,因而它为

1) L. N. Cooper, *Phys. Rev.*, **104**:1189 (1956).
2) H. Fröhlich, *Phys. Rev.*, **79**:845 (1950).

Cooper 模型的粒子间的吸引势提供物理的基础. 第十二章将详细研究电子-声子作用，目前我们并不想进一步论证 Cooper 模型的合理性.

考虑 Fermi 海中通过势 $\lambda V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 相作用的两个费米子的 Schrödinger 方程. 多粒子介质通过不相容原理而影响这两个费米子，不相容原理限制了容许的中间态，就像在第 11 节中一样. Schrödinger 方程

$$[T_1 + T_2 + \lambda V(1,2)]\psi(1,2) = E\psi(1,2) \tag{36.3}$$

可改写成略为不同的形式如下:

$$\psi(1,2) = \varphi_0(1,2) + \sum_{n\neq 0} \varphi_n(1,2)\frac{1}{E - E_n} \times \langle \varphi_n | \lambda V | \psi(1,2)\rangle, \tag{36.4}$$

$$E - E_0 \doteq \langle \varphi_0 | \lambda V | \psi(1,2)\rangle, \tag{36.5}$$

这里本征态 φ_n 是 H_0 的本征函数，

$$H_0\varphi_n = (T_1 + T_2)\varphi_n = E_n\varphi_n. \tag{36.6}$$

这两种形式是等价的，验证的办法如下: 对方程(36.4)应用算符 $H_0 - E = T_1 + T_2 - E$ 并利用 H_0 的本征态的完全性. 至于方程(36.5)只不过是 ψ 的归一化条件

$$\langle \varphi_0 | \psi \rangle = 1, \tag{36.7}$$

我们自然必须按照关系式 $\langle O\rangle = \langle \psi | O | \psi\rangle / \langle \psi | \psi\rangle$ 来计算所有其他期待值.

如果系统被限制在体积为 V 的大箱子中，未微扰的波函数是具有周期性边界条件的平面波

$$\varphi_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}(1,2) = V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}_1} V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}_2}. \tag{36.8}$$

为简化讨论，我们将忽略自旋的效应并把起始的两粒子当作不可区分的. 能够这样做的条件是，两粒子具有相反的自旋，而 V 则必须是与自旋无关的. 这是个多体问题，这一点现在

体现于下列限制之中，就是把方程 (36.4) 的对中间态求和加以限制，

$$\sum_n \to \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2>k_F}, \tag{36.9}$$

这是因为 Fermi 海中的别的态已全填满.

在均匀介质中，对偶的总动量守恒，所以我们引进下列定义

$$\mathbf{P} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad \mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \tag{36.10}$$

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2), \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \tag{36.11}$$

$$v = mV\hbar^{-2}, \tag{36.12}$$

$$E = \hbar^2\kappa^2 m^{-1} + \frac{1}{4}\hbar^2 P^2 m^{-1}. \tag{36.13}$$

Schrödinger 方程的解的形式为

$$\phi(1,2) = V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}} V^{-\frac{1}{2}} \phi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \tag{36.14}$$

这里第一个因子涉及质心运动，第二个因子则是相互作用电子对偶的内部波函数. 跟自由空间中的 Schrödinger 方程[方程 (11.8)] 不同，总动量 $\hbar\mathbf{P}$ 影响到内部波函数，因为填满的 Fermi 海提供了一个优先的参照系. 注意，如果两粒子原来在 Fermi 海内，P 不可能超过 $2k_F$. 将方程(36.14)代入方程 (36.4) 和 (36.5) 给出

$$\phi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \lambda \int_\Gamma \frac{d^3t}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{t}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\kappa^2 - t^2} \langle \mathbf{t}|v|\phi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}\rangle, \tag{36.15}$$

$$\left|\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{k}\right| < k_F, \quad \Gamma \equiv \left|\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{t}\right| > k_F,$$

$$\kappa^2 - k^2 = \lambda V^{-1} \langle \mathbf{k}|v|\phi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}\rangle, \tag{36.16}$$

这叫作 Bethe-Goldstone 方程[1]. 它不过是 Fermi 气体中两个费米子的 Schrödinger 方程，其中 Pauli 原理禁止已为其他费米子所占据的中间态出现. 既然相互作用的电子对偶原来处于 Fermi 海内，它不可能进行实的跃迁. 不过，它还可以进行虚的跃迁，跃迁到 Fermi 海以外的所有态上，这从方程 (36.15) 的最后一项可以看出，其中能量分母总不为零. 因此，除了原来的动量 $\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{k}$ 和 $\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{k}$ 之外，方程的解还包含一切未充填的态的动量.

一般地说，Bethe-Goldstone 方程只能用数值方法解出. 虽然在原理上直截了当，但这方法并不总是足够准确，常常不足以揭示 Fermi 海的相当微妙的特点. 所以我们要引进模型的两粒子势，它可以给出严格解. 首先，把势的概念推广到包括非定域势

$$v(\mathbf{x}) \to v(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \tag{36.17 a}$$

$$\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} v(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \to$$

$$\int d^3x d^3x' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} v(\mathbf{x},\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}'). \tag{36.17 b}$$

定域势于是作为极限而得出，

$$v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \to v(|\mathbf{x}|)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').$$

现在选择一个非定域的可分离势加以考虑，它取如下形式

$$v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = u(|\mathbf{x}|)u(|\mathbf{x}'|)^*, \tag{36.18}$$

其 Fourier 变换式是

$$\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u(x) = u(k). \tag{36.19}$$

显然，唯一的定域可分离势是 δ 函数

---

1) H. A. Bethe and J. Goldstone, *Proc. Roy. Soc.* (*London*), **A238**:551 (1957).

$$v(\mathbf{x}) = v\delta(\mathbf{x}),$$

但我们可以期望，非定域近似即方程（36.18）提供短程势的合理描述.

用可分离势，方程 (36.16) 成为

$$\kappa^2 - k^2 = \lambda V^{-1} u(k) \int d^3x u(x)^* \psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \qquad (36.20)$$

在右边以方程 (36.15) 代入，这给出

$$\kappa^2 - k^2 = \frac{\lambda |u(k)|^2}{V} + \lambda \int_\Gamma \frac{d^3t}{(2\pi)^3} u(t)^* \times \frac{1}{\kappa^2 - t^2} u(t)(\kappa^2 - k^2), \qquad (36.21)$$

这可以重新布置如下

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{V} \frac{|u(k)|^2}{\kappa^2 - k^2} + \int_\Gamma \frac{d^3t}{(2\pi)^3} \frac{|u(t)|^2}{\kappa^2 - t^2} \equiv f(\kappa^2). \qquad (36.22)$$

这个方程决定本征值 κ^2，并从而决定每一电子对偶的能量移动为

$$\Delta E = \hbar^2 m^{-1}(\kappa^2 - k^2). \qquad (36.23)$$

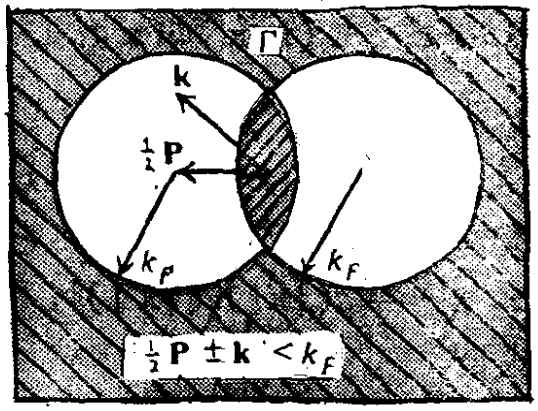


图 36.1　Bethe-Goldstone 方程在动量空间中的积分区域

用图解法研究方程(36.22)很容易.我们把方程右边记作 $f(\kappa^2)$，虽然它也依赖于参数 $\mathbf{P}$ 和 $\mathbf{k}$. 随着 κ^2 增长，$f(\kappa^2)$ 中的积分单调下降，当分母得以首次为零时，积分具有对数式

奇异性. 积分区域 Γ 示于图 36.1，它表明，这个发散性出现于 $\kappa^2 = k_F^2 - \frac{1}{4}P^2$. 还有，$f(\kappa^2)$ 的第一项在 $\kappa^2 = k^2$ 是奇异的，现在就容易作出 $f(\kappa^2)$ 的示意图如图 36.2 所示. 平滑的背景曲线代表积分项，它与 k^2 无关. 此外，$f(\kappa^2)$ 的第一项，只在 k^2 的紧邻才有贡献，因为它的系数正比于 V^{-1}，从而对于宏观系统，它变得很小. 其结果，$f(\kappa^2)$ 在可变点 $\kappa^2 = k^2$ 具有宽度很窄的奇异性，迭加在背景曲线上，背景曲线在 $\kappa^2 = k_F^2 - \frac{1}{4}P^2$ 是对数式奇异的.

本征值决定于 $f(\kappa^2)$ 与水平线 λ^{-1} 的交点. 显然，对于 $\lambda > 0$，只有一个解，它出现在

$$\kappa^2 - k^2 \approx \lambda V^{-1}|u(k)|^2 + O(\lambda^2). \qquad (36.24)$$

这里，积分项已被略去，因为它在 $\kappa^2 \approx k^2$ 是有限的，而只对 λ 的高级项有贡献. 我们作出结论，排斥势的唯一效应是把对偶的能量移动一个正比于 $|u(k)|^2V^{-1}$ 的小量，对于相互作用的介质，我们正期望是这样. 另一方面，图 36.2 也表明，对于每个 k^2，吸引势 $\lambda < 0$ 总是导致两个解，只要 $|\lambda|$ 不是太大. 这样，吸引作用就定性地改变了能谱. 虽然方程 (36.24) 的通

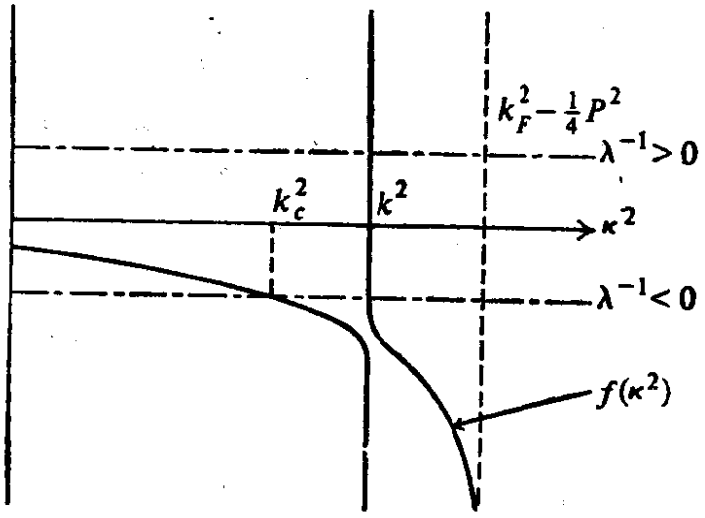


图 36.2 Bethe-Goldstone 方程的本征值方程 (36.22).

常的解仍然出现，我们还求得一个新的(反常的)解，它直接来源于 $f(\kappa^2)$ 的对数式奇异性. 这两个本征值哪一个低些，这取决于 k^2 和 $|\lambda|$ 的相对值. 如固定 $|\lambda|$，则存在一个相应的临界值 k_c^2，对于一切 $k > k_c$，反常解是较低的本征值，而对于 $k < k_c$，通常解是较低的. 从方程

$$(2\pi)^{-3}\int_\Gamma d^3t\,|u(t)|^2(k_c^2 - t^2)^{-1} = \lambda^{-1} \qquad (36.25)$$

可解出 k_c 的近似值，这是直线 λ^{-1} 同方程 (36.22) 中 $f(\kappa^2)$ 的来自积分的那部分的交点. 从图 36.2 看得明白，反常本征值实质上跟 k^2 无关，这样，对偶的基态能量同初始相对波矢 $\mathbf{k}$ 无关，只要 $k > k_c$. 这个行为跟通常解 (36.24) 很不同，对于通常解，如不算 V^{-1} 数量级的改正，则 $\kappa^2 \approx k^2$.

现在细致地研究反常本征值. 除非 k 严格地等于 k_c，方程 (36.22) 的第一项是可忽略的，这样，本征值 κ 实质上就等于 k_c 并遵守同一方程 (36.25)：

$$|\lambda|^{-1} = (2\pi)^{-3}\int_\Gamma d^3t\,|u(t)|^2(t^2 - \kappa^2)^{-1}. \qquad (36.26)$$

虽然可就一切 $P < 2k_F$ 研究这个方程，但置 $P = 0$ 最为简单，这时本征值条件成为

$$\frac{1}{|\lambda|} = \int_{k_F}^{\infty}\frac{t^2dt}{2\pi^2}\frac{|u(t)|^2}{t^2 - \kappa^2}$$

$$= \frac{k_F}{2\pi^2}\int_1^{\infty} x^2\,dx\,\frac{|u(k_Fx)|^2}{x^2 - (\kappa/k_F)^2}. \qquad (36.27)$$

通过分部积分可把这个积分的对数式奇异性提取出来，

$$\frac{1}{|\lambda|} \approx \frac{k_F}{4\pi^2}|u(k_F)|^2\ln\frac{k_F^2}{k_F^2 - \kappa^2}. \qquad (36.28)$$

在达到方程 (36.28) 的过程中，我们曾假定，势是动量的平滑函数，忽略了余下的有限积分. 既然 κ^2 小于 k_F^2，我们写出

$$\kappa^2 = k_F^2 - m\Delta\hbar^{-2}, \qquad (36.29)$$

简单的重新布置给出

$$\Delta = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \exp\left[- \frac{4\pi^2}{k_F |\lambda| |u(k_F)|^2} \right]. \qquad (36.30)$$

前面已提到过，只要 $k > k_c$，方程 (36.29) 就决定对偶的基态能量. Δ 的相应表示式具有几个很值得注意的特点:

1. 在靠近 Fermi 表面处，对偶的能量移动 $\Delta E = \hbar^2 m^{-1} (\kappa^2 - k^2) = 2(\epsilon^0_{k_F} - \epsilon^0_k) - \Delta$ 是负的，且与体积无关.

2. 就耦合常数而言，Δ 具有本性奇点，不可能用微扰理论得到 Δ.

3. $P = 0$ 的那些对偶的 $\Delta(P)$ 最大，因为 (36.26) 的分母为零的相空间这时最大. 如 $P = 0$，可以看出，在 Fermi 球的表面上每一处，t 都达到极小值 (图 36.1)；而对于有限的 $|\mathbf{P}|$，极小值只出现在半径为 $\left(k_F^2 - \frac{1}{4} P^2\right)^{\frac{1}{2}}$ 的一个圆上.

4. 对于无论怎样弱的吸引势，只要力程是有限的，都出现束缚对偶，这就一定有介质存在才行；自由空间中的两个粒子，如果势的强度不超过某个临界值，就并不形成束缚对偶. 这个结果也可从方程 (36.30) 看出，因为当 $k_F \to 0$，Δ 指数式地趋于零.

前面的计算意味着，靠近 Fermi 表面，动量和自旋相反的两粒子形成束缚对偶，只要粒子间的势是吸引的[1]. 用这种方式，系统使其能量降低一个量 Δ，原来的未微扰基态明显地成为不稳定的. 不幸的是，Cooper 模型只限于两个粒子，因而它不可能描写新的基态，这新的基态显然涉及许多束缚对偶.

不过，这计算毕竟还是提供了不稳定性的定性描述，它还

---

1) 在原则上，两个粒子，其自旋平行，处于反对称空间态，也可形成束缚态. 就吸引势属于短程来说，我们期望这效应在(对称的)相对的 s 态最大.

指出新的基态不能用微扰展开得到. 第 37 节将说明 Bogoliubov 正则变换怎样使我们得以研究这样一个系统的多体基态.

37. 相互作用 Fermi 气体

现在讨论怎样把 Cooper 对偶的形成并入一个协调的多体理论. 基本的想法是, 如果粒子间势是吸引的, 处于态 $(\mathbf{k}\uparrow)$ 和态 $(-\mathbf{k}\downarrow)$ 的粒子间的配对可使得 Fermi 海不稳定. 其结果是, 这些态起着特殊的作用, 所以作下列正则变换[1)]

$$\alpha_{\mathbf{k}} = u_k a_{\mathbf{k}\uparrow} - v_k a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}, \qquad \beta_{-\mathbf{k}} = u_k a_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_k a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}. \tag{37.1}$$

c 数系数 u_k 和 v_k 是实的且只依赖于 $|\mathbf{k}|$. 这个线性变换是正则的, 充分而且必要的条件是, 新算符遵从关系式

$$\begin{cases} \{\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}'}\} = \{\beta_{\mathbf{k}}, \beta^{\dagger}_{\mathbf{k}'}\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\ \text{所有其余的反对易式} = 0. \end{cases} \tag{37.2}$$

已知原来的反对易关系式为

$$\{a_{\mathbf{k}\lambda}, a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\lambda'}\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{37.3}$$

容易看出方程 (37.2) 意味着

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \tag{37.4}$$

这些方程可以反过来给出

$$a_{\mathbf{k}\uparrow} = u_k \alpha_{\mathbf{k}} + v_k \beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}}, \tag{37.5 a}$$

$$a_{-\mathbf{k}\downarrow} = u_k \beta_{-\mathbf{k}} - v_k \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} \tag{37.5 b}$$

像在第六章中那样, 考虑零温度的热力学势 $\Omega(T = 0,$

---

1) N. N. Bogoliubov, *Sov. Phys. -JETP*, **7**:41 (1958); J. G. Valatin, *Nuovo Cimento*, **7**:843 (1958); S. T. Beliaev, Introduction to the Bogoliubov Canonical Transformation Method, in C. De Witt (ed.), "The Many Body Problem", p. 343, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1959; S. T. Beliaev, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. -Fys. Medd*, **31**, no. 11 (1959).

$V,\mu)$，这是下式的期待值[比较方程 (18.29)]

$$\begin{aligned}\hat{K} &= \hat{H} - \mu\hat{N} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}(\epsilon^0_k - \mu) \\ &\quad - \frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4 \\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}} \langle \mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2|\, V\,|\mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4\rangle \\ &\quad \times a^{\dagger}_{\mathbf{k}_1\lambda_1}a^{\dagger}_{\mathbf{k}_2\lambda_2}a_{\mathbf{k}_4\lambda_4}a_{\mathbf{k}_3\lambda_3}. \qquad (37.6)\end{aligned}$$

利用热力学势可处理粒子数不确定的系集. 当然，在结尾时，要选定化学势以保证 $\langle\hat{N}\rangle = N$. 我们还假定吸引的相互作用势 $V > 0$.

现在把热力学势用算符 $\alpha_{\mathbf{k}}$ 和 $\beta_{\mathbf{k}}$ 加以改写，算符按正规次序排列，所有消灭算符在所有产生算符的右边. 虽然这一步骤可以直接地实行，但用 Wick 定理比较简单得多. 考虑算符 $a^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow}$，它可表示如下

$$a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow} = N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow}) + a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow}. \qquad (37.7)$$

这里 N 代表算符 α 和 β 的正规编序[1]. 如果 $|\mathbf{O}\rangle$ 是由条件

$$\alpha_{\mathbf{k}}|\mathbf{O}\rangle = \beta_{\mathbf{k}}|\mathbf{O}\rangle = 0 \qquad (37.8)$$

所表征的新的真空，则方程 (37.7) 的真空期待值给出

$$\begin{aligned}a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow} &= \langle\mathbf{O}|(u_k\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} + v_k\beta_{-\mathbf{k}})(u_{k'}\alpha_{\mathbf{k}'} + v_{k'}\beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}'})|\mathbf{O}\rangle \\ &= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}v_k^2, \qquad (37.9)\end{aligned}$$

类似地还有

$$a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{-\mathbf{k}'\downarrow} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}v^2_{\mathbf{k}}. \qquad (37.10)$$

这样，方程 (37.6) 的第一项成为

$$\sum_{\mathbf{k}}(\epsilon^0_k - \mu)(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}\uparrow} + a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{-\mathbf{k}\downarrow})$$

---

1) 为了使这与 Wick 定理的形式联系更完全，我们可以认为这些算符依赖于时间，左边的算符的时间比右边的迟一个无限小的时间；不过，稍加思考，读者就会相信这是不必要的.

$$= \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_k^0 - \mu)[2v_k^2 + N(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}) + N(a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow})]$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_k^0 - \mu)[2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2) \times (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) + 2u_k v_k (\beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger)], \quad (37.11)$$

这里正规乘积已用 (37.5) 算出.

方程 (37.6) 的势能部分要困难一些. 为了简单，假定势是与自旋无关的:

$$\langle \mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2 | V | \mathbf{k}_3\lambda_3\mathbf{k}_4\lambda_4 \rangle = \delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\langle \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3\mathbf{k}_4 \rangle. \quad (37.12)$$

此外，显式

$$\langle \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3\mathbf{k}_4 \rangle = V^{-2} \iint d^3x d^3y\, e^{-i(\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x} + \mathbf{k}_2\cdot\mathbf{y})} \times V(\mathbf{x},\mathbf{y}) e^{i(\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{x} + \mathbf{k}_4\cdot\mathbf{y})}$$

表明矩阵元具有下述对称性质:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3\mathbf{k}_4 \rangle &= \langle \mathbf{k}_2\mathbf{k}_1 | V | \mathbf{k}_4\mathbf{k}_3 \rangle \\ &= \langle -\mathbf{k}_3\ -\mathbf{k}_4 | V | -\mathbf{k}_1\ -\mathbf{k}_2 \rangle \\ &= \langle -\mathbf{k}_1\ -\mathbf{k}_2 | V | -\mathbf{k}_3\ -\mathbf{k}_4 \rangle, \end{aligned} \quad (37.13)$$

在达到最后一道等式时，假定了关系式 $V(\mathbf{x},\mathbf{y}) = V(-\mathbf{x}, -\mathbf{y})$. 势能算符现在可用(37.13)改写如

$$\hat{V} = \hat{V}_a + \hat{V}_b, \quad (37.14)$$

这里

$$\hat{V}_a = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \langle \mathbf{k}\mathbf{k}' | V | \mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{q} \rangle \times [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} + a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow} a_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}], \quad (37.15\,a)$$

$$\hat{V}_b = -\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \langle \mathbf{k}-\mathbf{k}' | V | \mathbf{k}+\mathbf{q}, -\mathbf{k}'-\mathbf{q} \rangle \times [a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}]. \quad (37.15\,b)$$

$\hat{V}_a$ 的两项只是算符的下标不同，而方程 (37.5 a) 与 (37.5 b) 的比较表明，用代换 ($\alpha_{\mathbf{k}} \longleftrightarrow \beta_{-\mathbf{k}}$ 和 $v \longleftrightarrow -v$) 可从第一项得出第二项. 所以我们集中注意于第一项；相应的算符乘积可用 Wick 定理改写为

$$\begin{aligned} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\uparrow}a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} &= N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\uparrow}a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\uparrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}) + \delta_{\mathbf{q},0}v^2_{k}N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\uparrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow}) \\ &\quad + \delta_{\mathbf{q},0}v^2_{k'}N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}) - \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}v^2_{k'}N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}) \\ &\quad - \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}v^2_{k}N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\uparrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow}) \\ &\quad + \delta_{\mathbf{q},0}v^2_{k}v^2_{k'} - \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}+\mathbf{q}}v^2_{k}v^2_{k'}, \end{aligned} \tag{37.16}$$

仅有的非零收缩已用方程(37.9) 和 (37.10)算出. 按这方式，方程 (37.15 a) 成为下式

$$\begin{aligned} \hat{V}_a = N(\hat{V}_a) &- \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\langle \mathbf{k}\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\mathbf{k}'\rangle - \langle \mathbf{k}\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}'\mathbf{k}\rangle) \\ &\times \{[v^2_{k}v^2_{k'} + 2v^2_{k'}N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}\uparrow})] \\ &+ [\alpha_{\mathbf{k}} \longleftrightarrow \beta_{-\mathbf{k}}, v \longleftrightarrow -v]\}, \end{aligned}$$

这已用方程 (37.13) 稍加简化. 第二项中的正规乘积已在 (37.11) 中算出，所以我们求出

$$\begin{aligned} \hat{V}_a = N(\hat{V}_a) &- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\langle \mathbf{k}\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\mathbf{k}'\rangle - \langle \mathbf{k}\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}'\mathbf{k}\rangle) \\ &\times [v^2_{k}v^2_{k'} + v^2_{k'}(u^2_{k} - v^2_{k})(\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} + \beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}}\beta_{-\mathbf{k}}) \\ &+ v^2_{k'}(2u_{k}v_{k})(\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}})]. \end{aligned} \tag{37.17}$$

余下的贡献 $\hat{V}_b$ 可按类似的方式加以处理. 我们需要下列收缩

$$\begin{cases} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\mathbf{k}'\downarrow} = a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow} = u_{k}v_{k}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \\ a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{-\mathbf{k}'\downarrow} = a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow} = 0, \end{cases} \tag{37.18}$$

而 $\hat{V}_b$ 中的算符成为

$$\begin{aligned} &a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\mathbf{k}'\downarrow}a_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \\ &\quad = N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\mathbf{k}'\downarrow}a_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}) \\ &\qquad + \delta_{\mathbf{q},0}v^2_{k}N(a^{\dagger}_{-\mathbf{k}'\downarrow}a_{-\mathbf{k}'\downarrow}) + \delta_{\mathbf{q},0}v^2_{k'}N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}) \end{aligned}$$

$$+\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}u_k v_k N(a_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow})$$
$$+\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow})+\delta_{\mathbf{q},0}v_k^2v_{k'}^2,$$
$$+\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}u_k v_k u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}.$$

这最后一个方程可与方程 (37.15 b) 相结合给出

$$\hat{V}_b = N(\hat{V}_b) - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\langle\mathbf{k}-\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\ -\mathbf{k}'\rangle v_{k'}^2[v_k^2$$
$$+N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}\uparrow})+N(a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{-\mathbf{k}\downarrow})]$$
$$-\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\langle\mathbf{k}\ -\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\ -\mathbf{k}'\rangle u_{k'}v_{k'}[u_k v_k$$
$$+N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow})+N(a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow})],$$

这里已作了某些简单的变数代换并利用了方程 (37.13). 各个正规乘积是容易算出的，我们求得

$$\hat{V}_b = N(\hat{V}_b) - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(u_k v_k u_{k'}v_{k'}\langle\mathbf{k}-\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\ -\mathbf{k}'\rangle$$
$$+v_k^2v_{k'}^2\langle\mathbf{k}\ -\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\ -\mathbf{k}'\rangle)$$
$$-\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\{(\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}+\beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}}\beta_{-\mathbf{k}})[(u_k^2-v_k^2)v_{k'}^2$$
$$\times\langle\mathbf{k}\ -\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\ -\mathbf{k}'\rangle$$
$$-2u_k v_k u_{k'}v_{k'}\langle\mathbf{k}\ -\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'-\mathbf{k}'\rangle]\}$$
$$-\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\{(\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\beta^{\dagger}_{-\mathbf{k}}+\beta_{-\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}})\times[(u_k^2-v_k^2)u_{k'}v_{k'}$$
$$\times\langle\mathbf{k}\ -\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\ -\mathbf{k}'\rangle$$
$$+2u_k v_k v_{k'}^2\langle\mathbf{k}-\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}-\mathbf{k}'\rangle]\}. \qquad (37.19)$$

现在可以把方程 (37.11)，(37.17) 和 (37.19) 相结合，以得到热力学势

$$\hat{K} = U + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + N(\hat{V}), \qquad (37.20)$$

这里

$$U = 2\sum_{\mathbf{k}}(\varepsilon_k^0-\mu)v_k^2 - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\langle\mathbf{k}\mathbf{k}'|\bar{V}|\mathbf{k}\mathbf{k}'\rangle v_k^2v_{k'}^2,$$

$$- \sum_{\mathbf{kk}'} \langle \mathbf{k}\ -\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\ -\mathbf{k}'\rangle u_k v_k u_{k'} v_{k'}, \quad (37.21\text{a})$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger}\beta_{-\mathbf{k}}) \Big\{ \Big[\varepsilon_k^0 - \mu - \sum_{\mathbf{k}'} (\langle \mathbf{kk}'|\bar{V}|\mathbf{kk}'\rangle v_{k'}^2) \Big] (u_k^2 - v_k^2) + 2u_k v_k \sum_{\mathbf{k}'} (\langle \mathbf{k}\ -\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'-\mathbf{k}'\rangle u_{k'} v_{k'}) \Big\}, \quad (37.21\text{b})$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \beta_{-\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}) \Big\{ 2 \Big[\varepsilon_k^0 - \mu - \sum_{\mathbf{k}'} (\langle \mathbf{kk}'|\bar{V}|\mathbf{kk}'\rangle v_{k'}^2) \Big] u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \times \sum_{\mathbf{k}'} (\langle \mathbf{k}\ -\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\ -\mathbf{k}'\rangle u_{k'} v_{k'}) \Big\}, \quad (37.21\text{c})$$

并引入了缩写

$$\langle \mathbf{kk}'|\bar{V}|\mathbf{kk}'\rangle \equiv \langle \mathbf{kk}'|V|\mathbf{kk}'\rangle - \langle \mathbf{kk}'|V|\mathbf{k}'\mathbf{k}\rangle + \langle \mathbf{k}\ -\mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\ -\mathbf{k}'\rangle. \quad (37.22)$$

定义一个新的单粒子能量

$$\varepsilon_k \equiv \varepsilon_k^0 - \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{kk}'|\bar{V}|\mathbf{kk}'\rangle v_{k'}^2, \quad (37.23)$$

(可以证明这就是 Hartree-Fock 表示式)，而且 ε_k 从化学势算起，即用

$$\xi_k \equiv \varepsilon_k - \mu \quad (37.24)$$

将是方便的. 最后，用关系式

$$\Delta_k \equiv \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}-\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'-\mathbf{k}'\rangle u_{k'} v_{k'} \quad (37.25)$$

引进能隙，而 $\hat{K}$ 的各个项成为

$$U = 2\sum_{\mathbf{k}} \xi_k v_k^2 + \sum_{\mathbf{kk}'} v_k^2 v_{k'}^2 \langle \mathbf{kk}'|\bar{V}|\mathbf{kk}'\rangle$$

$$-\sum_{\mathbf{k}} u_k v_k \Delta_k, \tag{37.26 a}$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger}\beta_{-\mathbf{k}})[(u_k^2 - v_k^2)\xi_k + 2u_k v_k \Delta_k], \tag{37.26 b}$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \beta_{-\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}})[2u_k v_k \xi_k - (u_k^2 - v_k^2)\Delta_k]. \tag{37.26 c}$$

必须着重指出，方程 (37.20) 和 (37.26) 共同构成原来的算符的一个准确的重新布置.

到这里为止，对 u_k 和 v_k 的唯一限制是 (37.4)，现在要加上另外的约束

$$2\xi_k u_k v_k = \Delta_k(u_k^2 - v_k^2) \tag{37.27}$$

以使 $\hat{H}_2$ 为零. 下面的写法最容易体现条件 $u_k^2 + v_k^2 = 1$，

$$u_k = \cos\chi_k, \quad v_k = \sin\chi_k, \tag{37.28}$$

方程 (37.27) 于是成为

$$\xi_k \sin 2\chi_k = \Delta_k \cos 2\chi_k, \tag{37.29}$$

或

$$\tan 2\chi_k = \Delta_k \xi_k^{-1}. \tag{37.30}$$

简单的三角学给出

$$\begin{cases} \sin 2\chi_k = \pm\Delta_k E_k^{-1} = 2u_k v_k, \\ \cos 2\chi_k = \pm\xi_k E_k^{-1} = u_k^2 - v_k^2, \end{cases} \tag{37.31}$$

这里必须或者同取上面的符号或者同取下面的符号，而

$$E_k \equiv (\Delta_k^2 + \xi_k^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{37.32}$$

项 $\hat{H}_1$ 现在可改写为

$$\hat{H}_1 = \pm\sum_{\mathbf{k}} E_k(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger}\beta_{\mathbf{k}}), \tag{37.33}$$

这表明，必须取上面的符号以保证能量有下界. 按照这个选择，方程 (37.31) 和 (37.25) 成为

$$\begin{cases} u_k v_k = \dfrac{\Delta_k}{2E_k}, \\ u_k^2 = \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\xi_k}{E_k}\right), \\ v_k^2 = \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{\xi_k}{E_k}\right), \end{cases} \tag{37.34}$$

$$\Delta_k = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}-\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'-\mathbf{k}'\rangle \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}}. \tag{37.35}$$

这最后一个关系式是 BCS 能隙方程，它是能隙函数 Δ_k 的非线性积分方程[1].

零温度热力学势 $\hat{K}$，现在包含三项 $U + \hat{H}_1 + N(\hat{V})$，这里 U 是 c 数，$\hat{H}_1$ 对于准粒子数算符 $\alpha^\dagger\alpha$ 和 $\beta^\dagger\beta$ 是对角的，而 $N(\hat{V})$ 是四个准粒子产生和消灭算符的正规乘积. 这最后一项对 $U + \hat{H}_1$ 的基态没有贡献

$$\langle \mathbf{O}|N(\hat{V})|\mathbf{O}\rangle = 0, \tag{37.36}$$

它清楚地描写了准粒子间的相互作用. 对于许多系集，完全忽略 $N(\hat{V})$ 是一个好的近似，在这情况下，我们得到

$$\hat{K}_0 \equiv U + \hat{H}_1 = U + \sum_{\mathbf{k}} E_k(\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger\alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger\beta_{\mathbf{k}}). \tag{37.37}$$

即使在 $N(\hat{V})$ 不可忽略时，算符 $\hat{K}_0$ 也提供了微扰展开的基，现在就详细研究 $\hat{K}_0$ 的性质. 显然，U 是基态的热力学势，而 $E_k = (\Delta_k^2 + \xi_k^2)^{\frac{1}{2}}$ 代表每个受激准粒子的附加贡献. 注意 $E_k \geqslant \Delta_k$，这说明了能隙函数这个名称，因为激发态与基态隔开一个有限的空隙. 基态的平均粒子数由下式给出 [比较方程 (35.23)]

---

1) 这方程首先由 J. Bardeen, L. N. Cooper 和 J. R. Schrieffer 得出，*Phys. Rev.*, **108**:1175 (1957). 这里的处理则较接近于 Bogoliubov, Valatin 和 Beliaev, 前引文.

$$N = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \langle \mathbf{O} | a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda} | \mathbf{O} \rangle$$

$$= 2 \sum_{\mathbf{k}} v_k^2 = \sum_{\mathbf{k}} (1 - \xi_k E_k^{-1}), \quad (37.38)$$

这里用到方程 (37.9) 和 (37.10) 以算出矩阵元. 按类似的方式，总动量算符成为

$$\hat{\boldsymbol{P}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \mathbf{k} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} (a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} - a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} [N(a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}) - N(a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow})]$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} (\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \beta^{\dagger}_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}), \quad (37.39)$$

这里第三行是用方程 (37.9) 和 (37.10) 得出的. 我们看到

$$[\hat{K}_0, \hat{\boldsymbol{P}}] = 0, \quad (37.40)$$

因而把准粒子产生算符 $\alpha^{\dagger}$ 和 $\beta^{\dagger}$ 作用于 $|\mathbf{O}\rangle$ 所得的激发态是 $\hat{K}_0$ 和 $\hat{\boldsymbol{P}}$ 两者的本征态.

再前进一步，就要求有能隙方程 (37.35) 的细致的解. 既然它是齐次方程，总是存在着平凡解

$$\Delta_k = 0 \quad (\text{对于一切 } \mathbf{k}), \quad \text{正常解}, \quad (37.41)$$

这描写正常基态 (填满的 Fermi 海). 可以立即得到这一等式，因为方程 (37.32) 和 (37.34) 这时成为

$$\begin{cases} E_k = |\xi_k|, \\ u_k v_k = 0, \\ u_k^2 = \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\xi_k}{|\xi_k|}\right) = \theta(\epsilon_k - \mu), \\ v_k^2 = \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{\xi_k}{|\xi_k|}\right) = \theta(\mu - \epsilon_k), \end{cases} \quad \text{正常解} \quad (37.42)$$

而方程 (37.1) 重现了变换到粒子和空穴的正则变换 [比较方程(7.34)]. 此外，方程 (37.26a) 恒等于零，基态的热力学势归结为第 10 节的 Hartree-Fock 数值.

在上述正常态的解之外，能隙方程还有 $\Delta \neq 0$ 的非平凡解，这称为超导解. 作为一个特定的模型，假定势的矩阵元在靠近 Fermi 表面的区域上为常数，而在其余一切地方为零:

$$\langle \mathbf{k}-\mathbf{k}|V|\mathbf{l}-\mathbf{l}\rangle = gV^{-1}\theta(\hbar\omega_D - |\xi_D|)\theta(\hbar\omega_D - |\xi_l|), \quad (37.43)$$

这里 $\hbar\omega_D$ 是为了使积分收敛而引进的截断. 这个模型适用于金属，在金属中，与晶格的作用导致靠近 Fermi 表面的电子之间的吸引作用[1] (见第十二章). 按这方式，势成为可分离的，可严格解出能隙方程. 容易验证，能隙函数的形式化为

$$\Delta_k = \Delta\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|), \quad (37.44)$$

这里 Δ 是常数，它是下列方程的解

$$1 = g(2V)^{-1}\sum_{\mathbf{k}}\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|)(\Delta^2 + \xi_k^2)^{-\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{2}g\int d^3k(2\pi)^{-3}\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|)(\Delta^2 + \xi_k^2)^{-\frac{1}{2}}. \quad (37.45)$$

在所有实际的情况中，$\hbar\omega_D$ 远小于 μ，我们可写出

$$(2\pi)^{-3}d^3k = 4\pi(2\pi)^{-3}k^2dk \approx N(0)d\xi, \quad (37.46)$$

这里

$$N(0) = \frac{1}{2\pi^2}\left[k^2\frac{dk}{d\varepsilon_k}\right]_{\varepsilon_k=\mu} \quad (37.47)$$

是 Fermi 面上具有某一种自旋投影的态的密度. 方程(37.45)现在可算出如

$$1 = \frac{gN(0)}{2}\int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D}\frac{d\xi}{(\Delta^2 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}} = gN(0)\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{d\xi}{(\Delta^2 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}}$$

---

1) H. Fröhlich, 前引文.

$$\approx gN(0)\ln\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta}, \tag{37.48}$$

这里只是就 $\hbar\omega_D/\Delta \gg 1$ 保留了首项. 简单的变换给出

$$\Delta = 2\hbar\omega_D\exp\left(-\frac{1}{N(0)g}\right), \tag{37.49}$$

它表现的非解析结构与方程 (36.30) 中的相同. 对于典型的金属，$\hbar\omega_D$ 可认为是平均声子能量 $\hbar\omega_D \approx k_B\theta$ (Debye 能量) 而 $N(0)g \approx 0.2 - 0.3$ (见表 51.1).

相应的量 u_k^2 和 v_k^2 成为

$$\begin{cases} u_k^2 = \dfrac{1}{2}\left[1 + \xi_k(\Delta^2 + \xi_k^2)^{-\frac{1}{2}}\right], \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\text{超导解.} \\ v_k^2 = \dfrac{1}{2}\left[1 - \xi_k(\Delta^2 + \xi_k^2)^{-\frac{1}{2}}\right], \end{cases} \tag{37.50}$$

图解示于图 37.1. 既然 v_k^2 是准粒子的分布函数，我们看到，正常态的尖锐分明的 Fermi 面变模糊了，成为厚度为 Δ 的一个能量范围了. 注意方程 (37.50) 可微分无限多次，这样，它不可能用微扰论从方程 (37.42) 的不连续阶跃函数得出.

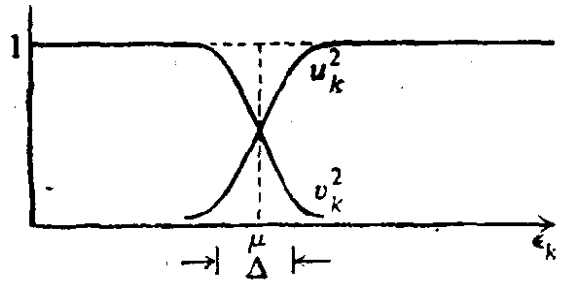


图 37.1 超导解的分布函数 $v_k^2 = 1 - u_k^2$.

对于固定的化学势 μ，所得到的超导态 $\hat{K}_0$ 激发谱示于图 37.2，它清楚地指出能隙 Δ 的作用. 于 $\Delta \to 0$ 的极限，它恢复为正常态激发谱，如虚线所示. 在正常态中，甚至对于 $\epsilon_k < \mu$，E_k 也是正的，这个表面上的矛盾是容易解释的，只要记得这里所有的能量都是从化学势或 Fermi 能算起的(回忆 $\hat{K} \equiv$

$\hat{H}-\mu\hat{N}$). 这样，$N-1$ 个粒子和一个空穴的基态是包含 $N-1$ 个粒子的填满的 Fermi 海，产生一个 $\epsilon_k<\mu$ 的空穴因此至少需要能量 $\mu-\epsilon_k=|\xi_k|>0$ [比较方程 (7.61) 后面的讨论][1].

比较正常和超导基态的物理性质是有意义的. 对于一定的 μ，粒子数由方程 (37.38) 决定，我们求得

$$\begin{aligned} N_s-N_n &= 2\sum_{\mathbf{k}}(v_k^2|_s-v_k^2|_n) \\ &= V(2\pi)^{-3}\int d^3k\xi_k[\,|\xi_k|^{-1}-(\xi_k^2+\Delta^2)^{-\frac{1}{2}}] \\ &\approx VN(0)\int d\xi\xi[\,|\xi|^{-1}-(\xi^2+\Delta^2)^{-\frac{1}{2}}] \\ &= 0, \end{aligned} \tag{37.51}$$

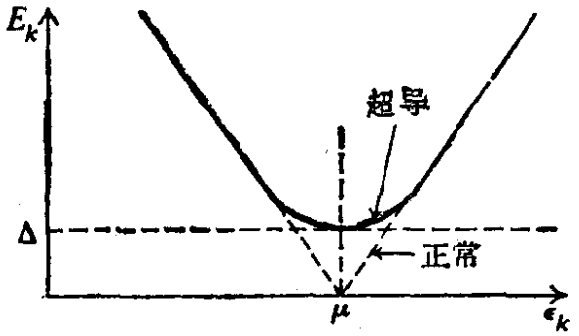


图 37.2　正常解和超导解的激发谱之比较.

这是因为被积函数是 ξ 的奇函数. 这里我们注意到，对积分的仅有的贡献来自 Fermi 表面的紧邻，因此可以利用方程 (37.46). 结果是，在这样的近似下，从正常态到超导态的转变，并不改变平均粒子数. 或者说，如果认为粒子数 N 为固定的，则两者的化学势只相差一个很小的量 $(\mu_s-\mu_n)/\mu_n=\delta$.

具有直接物理意义的量是，N 固定时基态能量的改变

1) 如果 $\mu(N)$ 是由方程 (37.38) 决定的，则 E_k 是 N 固定时的激发能，第 58 节将详加讨论.

$$E_s - E_n = U_s(\mu_s) - U_n(\mu_n) + (\mu_s - \mu_n)N$$
$$= U_s(\mu_n) - U_n(\mu_n) + \delta\mu_n\left[\left(\frac{\partial U_s}{\partial \mu}\right)_{\mu_n} + N\right]$$
$$+ O(\delta^2)$$
$$\approx U_s(\mu_n) - U_n(\mu_n), \qquad (37.52)$$

这里线性项由于方程 (4.9) 而为零. 既然 δ 很小，我们只需计算 μ 固定时的热力学势的改变[比较方程(30.72)的推导]. 这个式子容易用方程 (37.26a), (37.34) 和 (37.42) 算出. 假定矩阵元 $\langle \mathbf{kk}'|\bar{V}|\mathbf{kk}'\rangle \equiv g/V$ 在 Fermi 表面的附近是常数,就有

$$E_s - E_n = 2\sum_{\mathbf{k}} \xi_k[v_k^2|_s - v_k^2|_n] - \sum_{\mathbf{k}} \Delta(u_k v_k)|_s$$
$$+ gV^{-1}\sum_{\mathbf{kk}'}[(v_k^2 v_{k'}^2)|_s - (v_k^2 v_{k'}^2)|_n]$$
$$= \sum_{\mathbf{k}}\left[\frac{\xi_k^2}{|\xi_k|} - \frac{\xi_k^2}{(\xi_k^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\right]$$
$$- \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta^2}{(\xi_k^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}} + \frac{g}{4V}$$
$$\times \sum_{\mathbf{kk}'}\left\{\left[1 - \frac{\xi_k}{(\xi_k^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\right]\left[1 - \frac{\xi_{k'}}{(\xi_{k'}^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\right]\right.$$
$$\left. - \left(1 - \frac{\xi_k}{|\xi_k|}\right)\left(1 - \frac{\xi_{k'}}{|\xi_{k'}|}\right)\right\}$$
$$\approx VN(0)\int d\xi\left[\frac{\xi^2}{|\xi|} - \frac{\xi^2}{(\xi^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2}\frac{\Delta^2}{(\xi^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\right]$$
$$+ \frac{gV[N(0)]^2}{4}\times\iint d\xi d\xi'$$
$$\times\left\{\left[1 - \frac{\xi}{(\xi^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\right]\left[1 - \frac{\xi'}{(\xi'^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\right]\right.$$

$$-\left(1-\frac{\xi}{|\xi|}\right)\left(1-\frac{\xi'}{|\xi'|}\right)\Big\}$$

$$=-\frac{1}{2}VN(0)\Delta^2=\Omega_s-\Omega_n, \tag{37.53}$$

其中二重积分由于对称性而为零[1]. 回忆起关于 Cooper 对偶的讨论,可把这个式子解释为每个对偶的结合能Δ,乘以 Fermi 表面附近的厚为Δ的壳层中的对偶的数目 $VN(0)\Delta/2$.正是这一壳层中的对偶可以形成 Cooper 束缚对偶而降低能量.

方程 (37.53) 表明,超导态确实具有低于正常基态的能量和热力学势,因而是相互作用系统的真正基态的较好近似. 这个结论来自决定基态能量的同一变分原理,因为方程 (37.36) 表明 Ω_n 和 Ω_s 是准确的算符 $\hat{K}$ [方程 (37.20)]在 $\hat{K}_0$ [方程 (37.37)]的归一化基态中的期待值.

习　　题

10.1　考虑一个 Bose 系统,大规模地占据着动量为 $\hbar\mathbf{q}$ 的单个模. 假定方程 (35.1) 的赝势模型,试求凝聚态的耗尽度作为 $\mathbf{v}=\hbar\mathbf{q}/m$ 的函数. 计算总动量 $\mathbf{P}$,并与 $N_0\hbar\mathbf{q}$ 比较[与习题 6.6 比较].

10.2　考虑均匀的不可压缩的背景中的稠密而带电且无自旋的 Bose 气体. 利用正则变换证明耗尽度和基态能量由 $(n-n_0)/n=0.211r_s^{3/4}$ 和 $E_0/N=-0.803r_s^{-3/4}e^2/2a_0$ 给出.

---

1) 方程 (4.3) 的热力学恒等式现在可用以计算 $\mu_s-\mu_n$. 假定单粒子谱 $\epsilon_k\approx\epsilon_k^0$, 我们求得 $\delta=-\frac{1}{8}(\Delta/\epsilon_p^0)^2[1+6(\partial\ln\Delta/\partial\ln N)]$, 这证明在(37.52)中略去 δ^2 改正是正当的. 不过,要注意 $N(\mu_s-\mu_n)/(E_s-E_n)=\frac{1}{3}[1+6(\partial\ln\Delta/\partial\ln N)]$ 的大小与 1 相差不多,因而 (37.52) 中单独的 δ 数量级的贡献并不可以忽略. 如 ω_D 和 g 跟 N 无关,则 $6(\partial\ln\Delta/\partial\ln N)$归结于 $2\ln(2\hbar\omega_D/\Delta)$.

在这些式中，$r_s^3 = 3/4\pi n a_0^3$ 而 $a_0 = \hbar^2/m_B e^2$，这里 m_B 是玻色子的质量(与习题 6.5 比较).

10.3 代换 $a_0 \to N_0^{1/2}$ 造成粒子数不守恒，试作 Legendre 变换以变换到零温度的热力学势 $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$，用以处理这个粒子数不守恒的问题. 假定非奇异势，进行正则变换；重新导出方程 (21.5)，(21.8)，(21.15)，并求基态能量.

10.4 (a) 试就 $P \ll 2k_F$ 求解方程(36.26)，并证明质心动量为 $\hbar\mathbf{P}$ 的对偶的结合能 $\Delta(P)$ 由 $\Delta(P) \approx \Delta(0) - \hbar v_F P$ 给出，这里 $v_F = \hbar k_F/m$ 而 $\Delta(0)$ 在方程 (36.30) 中给出.

(b) 如 $\Delta(0)/k_B \approx 10$ 开，试估计使 $\Delta(P)$ 为零的临界值 P.

10.5 试证明反常本征值对应于齐次 Bethe-Goldstone 方程的一个解.

(a) 利用方程 (36.15) 和 (36.18)，试求 Fermi 面附近而 $\mathbf{P} = 0$ 的束缚对偶的波函数 $\psi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ 的渐近形式；试解释它为什么不同于通常的指数函数形式.

(b) 试证在这个态中的均方根半径，由 $\langle x^2\rangle^{\frac{1}{2}} = (2/\sqrt{3})(\hbar v_F/\Delta)$ 给出，这里 $v_F = \hbar k_F/m$.

(c) 如 $\Delta/k_B \approx 10\,\mathrm{K}$，试估计均方根半径，并与习题 10.4 所导出的临界波数进行比较.

10.6 计算算符 $\hat{N}^2$ 在方程 (37.8) 的基态 $|\mathbf{O}\rangle$ 中的期待值，试证涨落由

$$\frac{\langle\hat{N}^2\rangle - \langle\hat{N}\rangle^2}{\langle\hat{N}\rangle^2} = \frac{\sum_{\mathbf{k}}(u_k v_k)^2}{\left(\sum_{\mathbf{k}} v_k^2\right)^2}$$

给出. 讨论正常的和超导的基态之间的差别.

10.7 计算方程 (37.8) 的基态中的配对幅度 $F_k^* \equiv \langle\mathbf{O}|$

$a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}|\mathbf{O}\rangle$ 和 $F_k \equiv \langle \mathbf{O}|a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow}|\mathbf{O}\rangle$. 用示意图描画它们作为 k 的函数的行为，证明它们在正常基态为零.

10.8 把超导基态的相关函数

$$C_{\lambda\lambda'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \mathbf{O}|\tilde{n}_{\lambda}(\mathbf{x})\tilde{n}_{\lambda'}(\mathbf{x}')|\mathbf{O}\rangle$$

化为定积分. 试就反平行自旋算出这个式子，并与正常基态的相应情况进行比较.

10.9 超导基态原来是用变分原理推导出来的[1]，所考虑的是态

$$|\varphi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_k + v_k a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow})|0\rangle,$$

这里乘积遍及所有 $\mathbf{k}$，$|0\rangle$ 是无粒子态.

(a) 试证如 $u_k^2 + v_k^2 = 1$，则 $|\varphi\rangle$ 是归一化的.

(b) 试证 $\hat{K}$ [方程 (37.6)] 在这个状态中的期待值是 U [方程 (37.21 a)].

(c) 在约束条件 $u^2 + v^2 = 1$ 的限制下作 u_k 和 v_k 的变分，试证能隙方程 (37.35) 是热力学势的极小条件.

(d) 除了归一化以外，试验证 $a^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}|\varphi\rangle$ 和 $a_{-\mathbf{k}\downarrow}|\varphi\rangle$ 两者代表同一个与 $|\varphi\rangle$ 正交的态. 算出 $\hat{K}$ 在这个态中的期待值，并证明热力学势的增量是 E_k.

---

1) J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, **108**: 1175 (1957).

第五部分　在各种物理系统中的应用

第十一章　核　物　质

前面几章所阐述的技术的一个重要应用是研究原子核. 有限核的详细性质将在第十五章中讨论. 本章将集中讨论一个较为简单的问题，即根据两个核子间的相互作用来理解原子核的一些大块性质(核物质). 我们将简短地综述核子-核子力，并对核物质作出精确定义，从而引出这个问题的讨论.

38. 核力：综述

在这一节中我们将概述核子-核子相互作用的几个主要的经验性特点.

1. *它是吸力*：$J=1$ 且宇称为偶的氘的存在，表明质子与中子间的力基本上是吸引力，至少在自旋三重态(即 $^3S_1$ 态)是如此. 此外，在质子-质子系统中，库仑散射与核散射之间的干涉，表明质子间的核力在 $^1S_0$ 态也是吸引力. 最后，由稳定的自束缚原子核的存在可以清楚地看出，任何两个核子间的相互作用基本上都是吸引力.

2. *它是短程力*：在动量中心系中，入射核子的能量直到大约 10 兆电子伏为止，中子-质子散射的微分截面是各向同性的. 从而我们可以作出结论，散射发生在相对的 s 波态. 这一结果使我们能够从对散射振幅有贡献的最大角动量 $\hbar l_{\max}=rp$ 的经典极限出发，对核子-核子力的力程进行粗略

的估计．以能量与动量间的关系代入，得出

$$l_{\max}=r\left(\frac{2m_{\mathrm{red}}E}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\approx r\ (\text{费米})\left(\frac{E}{40\ \text{兆电子伏}}\right)^{\frac{1}{2}},\quad (38.1)$$

这里 m_{red} 是约化质量，并且利用了下列关系

$$1\ \text{费米}=1\mathrm{F}=10^{-13}\ \text{厘米},\quad (38.2)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}=20.8\ \text{兆电子伏}\cdot\text{费米}^2.\quad (38.3)$$

方程 (38.3) 是一个非常有用的结果，因为它给出了核物理中的能量尺度．对于直到 10 兆电子伏的能量，$l_{\max}<1$，故由方程 (38.1) 得出核力的力程为

$$r\approx\text{几个费米}.\quad (38.4)$$

3. 它与自旋有关：极低能下，中子-质子截面 σ_{np} 大得太过份了[1]，

$$\sigma_{np}(0)=20.4\ \text{靶}=20.4\times10^{-24}\text{厘米}^2.\quad (38.5)$$

以至于不能选择一个与氘核性质相拟合的势来导出它．由于测量到的中子-质子截面是三重态与单态截面的统计平均值

$$\sigma_{np}=\frac{3}{4}({}^3\sigma)+\frac{1}{4}({}^1\sigma),\quad (38.6)$$

故单态的势必定不同于氘核三重态的势．低能散射实验只测量势的两个参数．可以取这两个参数为散射长度 a 和有效力程 r_0，其定义由下式给出：

$$k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}+\frac{1}{2}r_0k^2\quad (38.7)$$

这里 δ_0 是 s 波相移[2]．对低能中子-质子散射进行大量分析，得出如下参数[3]：

1) M. A. Presston: "Physics of Nucleus", p. 25, Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Mass., 1962.

2) 对于有效力程理论的评述参阅 L. I. Schiff, "Quantum Mechanics", 3d.ed., p. 460, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968.

3) M. A. Preston, 前引书 pp. 26—27.

$$\begin{cases} {}^1a = -23.71 \pm 0.07 \text{ 费米}, \\ {}^3a = 5.38 \pm 0.03 \text{ 费米}, \end{cases}$$
$$\begin{cases} {}^1r_0 = 2.4 \pm 0.3 \text{ 费米}, \\ {}^3r_0 = 1.71 \pm 0.03 \text{ 费米}. \end{cases} \tag{38.8}$$

单态具有很大的负散射长度，因而恰好不能有束缚态（零能量的束缚态意味着 $a = -\infty$）. 与此相反，三重态系统具有一个束缚态，即氘，其结合能为 2.2 兆电子伏. 尽管单态和三重态的散射长度和零能量截面都有大的差异，单态的势与三重态的势事实上却是十分相似的，两者基本上都具有零能量束缚态.

4. 它是非有心力：由于氘核具有四极矩，其轨道角动量不可能是运动常数. 事实上，氘核基态必定包含 $l = 0$ 和 $l = 2$ 两者(偶宇称禁止 $l = 1$)，才会有非零的四极矩. 因而，核子-核子势在单纯空间坐标旋转下不可能不变. 对于自旋为 1/2 的粒子，势如果与速度无关，且在 $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ 所产生的总的转动下以及在空间反射下均不变，则其最一般的形式为

$$V = V_0(x) + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 V_1(x) + S_{12} V_T(x), \qquad \mathbf{x} \equiv \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \tag{38.9}$$

这里张量算符的定义为

$$S_{12} \equiv 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \hat{\mathbf{x}})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \hat{\mathbf{x}}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2. \tag{38.10}$$

自旋算符的任一高次幂，都可以利用 Pauli 矩阵的性质化简成方程 (38.9) 的形式. 核子-核子系统的总自旋由

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$$

给出，上式的平方给出

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{cases} -3 \text{ (单态, } S = 0), & \text{(38.11 a)} \\ +1 \text{ (三重态, } S = 1). & \text{(38.11 b)} \end{cases}$$

用方程(38.9)所构成的总哈密顿函数对于粒子自旋的交换是对称的.这意味着,在这个操作下,波函数必须或是对称的($S=1$)或是反对称的($S=0$).其结果是,对于两核子系统,总自旋 S 是一个好的量子数. 由于单态波函数 ${}^1\chi$ 为自旋算符所湮灭

$$\frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_2){}^1\chi=0,$$

故由方程(38.10)得

$$S_{12}{}^1\chi=0. \tag{38.12}$$

因而张量算符使单态湮灭,而仅仅作用在三重态上.

5. 它与电荷无关: 核子-核子力与电荷无关. 这意味着,在一个给定的两体态上,任何两个核子总是受同样的力. 然而, Pauli 原理把中子-中子系统和质子-质子系统限制于总体的反对称态上,因为它们是由两个全同的费米子构成的. 我们指定每个核子的动量与自旋投影 $|\mathbf{p}_1s_1\mathbf{p}_2s_2\rangle$,就可得到两个无相互作用的核子的态矢量的完全集合. 在相互作用系统中,仍然有八个好的量子数,可以取它们为: 能量,总角动量,总角动量在 z 方向的投影,自旋,宇称以及质心动量的三个分量,即 $|EJM_JS\pi\mathbf{P}_{cm}\rangle$. 各种态的宇称起源于其在空间交换下的性质,这种性质不一定和空间与自旋同时交换(粒子交换)下的性质一样. 我们把这些关系以及在任一个态上可能存在的对偶的类型一起列在表 38.1 中. 与电荷无关,意味着可以认为,所有三种对偶 nn, pp, np 占据的那些态中,力都是相等的. 然而,重要的是必须认识到: 与电荷无关,并不意味着,各种不同对偶的散射振幅和散射截面相等,这是因为可用的态是受到 Pauli 原理限制的. 例如,在低能情况下,我们有

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{np}=\frac{1}{4}|f({}^1S_0)|^2+\frac{3}{4}|f({}^3S_1)|^2 \tag{38.13 a}$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{nn} = |f(^1S_0)|^2 \qquad (38.13\,b)$$

表 38.1 核子-核子系统的低 l 态

态	$^1S_0$	$^1P_1$	$^1D_2$	$^3S_1+{}^3D_1$	$^3P_0$	$^3P_1$	$^3P_2+{}^3F_2$	$^3D_2$
宇称	+	−	+	+	−	−	−	+
粒子交换	−	+	−	+	−	−	−	+
粒子	nn		nn		nn	nn	nn	
	np	np	np	np[1]	np	np	np	np
	pp		pp		pp	pp	pp	

1) 氘核基态

而与电荷无关只不过要求

$$[f(^1S_0)]_{np} = [f(^1S_0)]_{pp} = [f(^1S_0)]_{nn}. \qquad (38.14)$$

6. **核力的交换性质**：当能量升高时，将有更多的分波对散射振幅作出贡献，从而使得分析变得很困难. 但是在足够高的能量，Born 近似为计算微分截面提供了有用的引导

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{cm} = \left|\frac{m}{4\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{x}}V(x)\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{x})d^3x\right|^2, \qquad (38.15\,a)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{cm} \approx \left|\frac{m}{4\pi\hbar^2}\int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}V(x)d^3x\right|^2, \qquad (38.15\,b)$$

这里

$$\mathbf{q}^2 \equiv (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)^2 = 4k^2\sin^2\left(\frac{1}{2}\theta\right). \qquad (38.16)$$

动量转移 $\hbar q$ 很大时，方程 (38.15 b) 中的被积函数振荡得很快，从而 Fourier 变换式将趋于零. 这样，势 $V(x)$ 所引起的散射应该给出随 θ 的增加而衰减的微分截面. 与此相反，在直到 600 兆电子伏 的实验室能量下，中子-质子散射截面由图 38.1 给出. 注意，这里有大量的向后散射存在；确实，这些结

果中给人印象最深的是，对 90° 的明显对称．如果这种对称性是严格的 $[f(\pi-\theta)=f(\theta)]$，则只有偶的 l 对散射振幅有贡献，因为奇的 l 将破坏截面的这种对称性．为了解释这一性质，人们引入了交换力的概念．这种交换力与波函数的对称性有关，写成

$$V_M = V(x)P_M, \tag{38.17}$$

这里 P_M 是 Majorana 空间交换算符，其定义为

$$P_M^{(i,j)}\varphi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \equiv \varphi(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i). \tag{38.18}$$

当它作用在轨道角动量为 l 的态上，我们有

$$P_M Y_{lm}(\hat{x}) \equiv Y_{lm}(-\hat{x}) = (-1)^l Y_{lm}(\hat{x}). \tag{38.19}$$

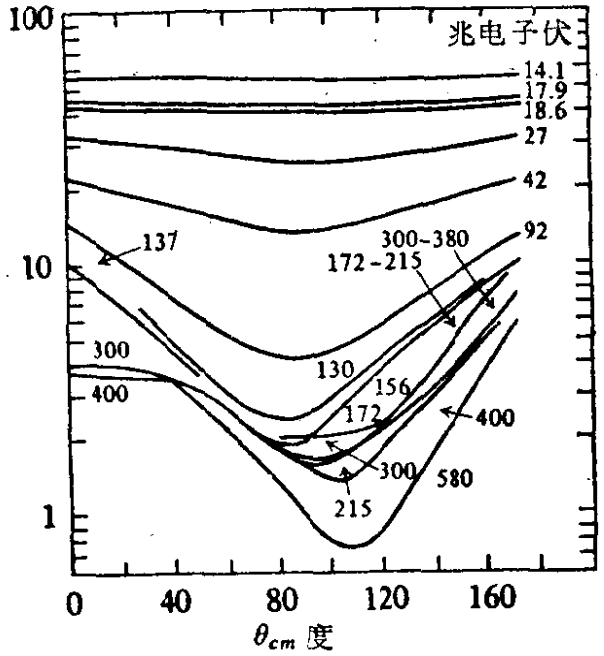


图 38.1　在动量中心系中，各种实验能量（以兆电子伏为单位）下的 n-p 微分截面的实验值（引自 M. A. Preston, "Physics of the Nucleus", p. 92. Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Mass., 1962.）

这样，奇数的 l 对散射振幅的贡献可用如下定义的 Serber 力

$$V \equiv V(x)\frac{1}{2}(1+P_M) \tag{38.20}$$

消去. 这样的势所引起的高能散射微分截面可用 Born 近似计算:

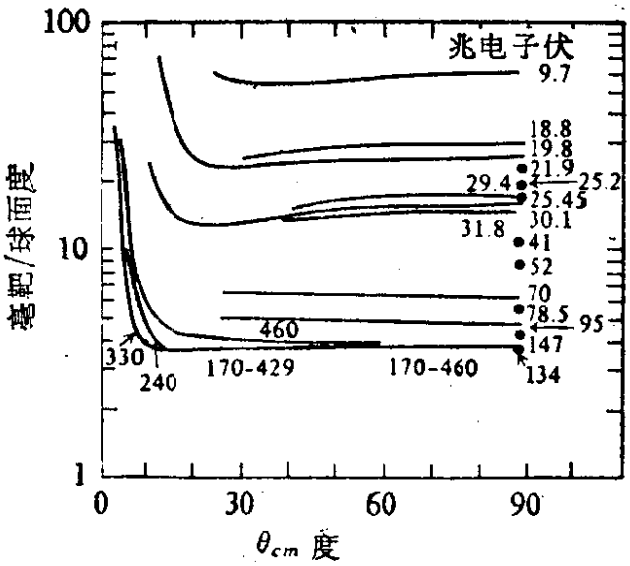


图 38.2 在动量中心系中，各种实验室能量（以兆电子伏为单位）下的 p-p 微分截面的实验值. 向前的峰来自库仑散射. (引自 M. A. Preston, "Physics of the nucleus", p. 93. Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Mass; 1962.)

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{cm} = \left|\frac{m}{4\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{x}}V(x)\frac{1}{2}(1+P_M)\,e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{x}}d^3x\right|^2$$

$$= \left|\frac{m}{4\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{x}}V(x)\frac{1}{2}(e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{x}}+e^{-\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{x}})d^3x\right|^2, \quad (38.21)$$

它显然是对 90° 对称的，相移分析证实核力大体上具有 Serber 交换性质，并且在奇 l 态具有弱的排斥性[1].

7. 有刚性核心：直到 500 兆电子伏的实验室能量，pp 微分截面如图 38.2 所示，因为粒子的全同性要求

$$\left.\frac{d\sigma(\pi-\theta)}{d\Omega}\right|_{cm} = \left.\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}\right|_{cm}, \quad (38.22)$$

---

1) 参阅，例如，M. H. Hull, Jr., K. E. Lassila, H. M. Ruppel, F. A. Mc Donald, and G. Breit, *Phys. Rev.*, **122**: 1606 (1961).

所以这里只画了 $\theta_{cm} < \frac{\pi}{2}$ 的部分. 尽管 np 系统和 pp 系统的微分截面看起来完全不同，但对这些过程进行与电荷无关的分析却是可能的[1]. pp 截面的核力部分的各向同性或许表明，即使在这样的一些高能量下也只有 s 波有贡献. 但这一结论却被 s 波微分截面的幺正性极限 k^{-2} 所排除. 这极限小于观察值 4 毫靶/球面角. 因而必定存在高次分波的干涉以给出平坦的角分布. 特别是，Jastraw 注意到，在单态势中的刚性核心将在较高的能量下改变 s 波相移的符号. 于是，pp 散射中的 ^1D–^1S 干涉项可能给出近似均匀的分布[2]. (用 Serber 力于 pp 散射，有贡献的低 l 态只是 $^1S_0$, $^1D_2$ 等等). Jastraw 的提示后来为精细的测量所证实，这些测量表明，在约 200 兆电子伏处，s 波相移变为负的，并指出单态核子-核子势有一个尺度为

$$r_c \approx 0.4 \text{ 费米} \tag{38.23}$$

的刚性核心. 进一步的相移分析还推论出在三重态中存在类似的刚性核[3].

8. *自旋-轨道力*：观察到被散射的核子在垂直于散射平面上的很大的极化. 这些效应很难只用有心力或张量力来解释，通常引入如下类型

$$V = -V_{so}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \tag{38.24}$$

的附加的自旋轨道力来理解这些极化. 自旋-轨道算符可以写成

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}[J(J+1) - l(l+1) - S(S+1)]. \tag{38.25}$$

---

1) 同上页注.

2) R. Jastraw, *Phys. Rev.*, **81**, 165 (1951); 还可参阅M. A. Preston, 前引书 p. 97.

3) 参阅例如 R. V.Reid, Jr., *Ann. Phys.* (N. Y.), **50**, 411 (1968).

显然，在单重态 ($S=0, l=J$) 和 s 态 ($l=0, S=J$)，自旋-轨道力为零. 通常的唯象的 V_{so} 具有非常短的力程. 因而自旋-轨道力只在高能下起作用，因为在 s 态它不存在，而离心势垒倾向于使高次的分波远离这势.

总结起来，我们现有的对核子-核子力的经验性了解如下:

1. 直到 ≈ 300 兆电子伏的实验数据，可用一系列只与自旋和宇称有关的势 ${}^1V_c^+$, ${}^3V_c^+$, ${}^1V_c^-$, ${}^3V_c^-$, ${}^3V_T^+$, ${}^3V_T^-$ 等等来拟合.

2. 势包含一个刚性核心，$r_c \approx 0.4$ 到 0.5 费米.

3. 在低能下奇 l 态的力相对较弱，并且平均说来略带排斥性.

4. 氘核的四极矩需要张量力.

5. 为了解释高能下的极化现象必须引入强的短程的自旋-轨道力.

最好的唯象的核子-核子势是 Hamada 和 Johnston[1]，Yale 小组[2]，以及 Reid[3] 提出的.

39. 核 物 质

Hofstadter 和他的同事们[4] 曾对短波长电子的核散射进行了广泛的研究；这些实验构成了原子核大小和电荷分布的现

---

1) T. Hamada and I. D. Johnston, *Nucl. Phys.*, **34**: 382 (1962).

2) K. E. Lassila, M. H. Hull, Jr., H. M. Ruppel, F. A. McDonald, and G. Breit, *Phys. Rev.*, **126**: 881 (1962).

3) R. V. Reid, Jr., 见前引文.

4) R. Hofstadter, *Rev., Mod. Phys.*, **28**: 214 (1956); 亦可参阅 R. Hofstadter, "Electron Scattering and Nuclear and Nucleon Structure", W A. Benjamin Inc., New York, 1963.

代图象的基础.

核半径与电荷分布

电子弹性散射的相移分析指出，平均电荷分布如图 39.1，并由

$$\rho = \rho_0(1 + e^{(r-R)/a})^{-1}$$

给出. 这里 a 决定趋肤厚度，R 是 $\rho = \frac{1}{2}\rho_0$ 的点. 这些参数有如下的有规则的性质:

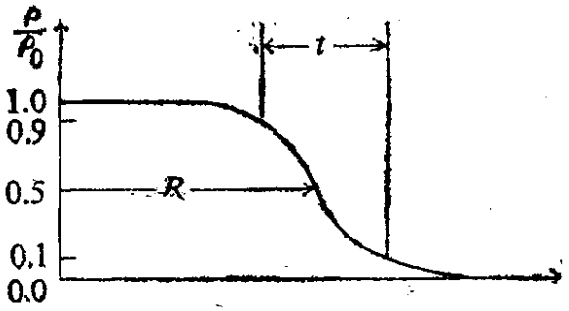


图 39.1 核电荷密度分布.

1. 对于不同的核， 由 $A\rho_0/Z$ 所定义的中心核密度为常数.

2. 半径 R 为

$$R = r_0 A^{\frac{1}{3}}, \qquad (39.1)$$

其中 $r_0 \approx 1.07$ 费米. 我们将估计核体积 V 为 $\frac{4}{3}\pi R^3$. 其直接的推论是，核物质中的粒子密度

$$\frac{A}{V} = \frac{3}{4\pi r_0^3} = 1.95 \times 10^{38} \text{个粒子/厘米}^3 \qquad (39.2)$$

为与核的大小无关的常数. (这对于， 例如， 原子是不正确的.)

3. 质子的均方根半径[1] 为 $r_p \approx 0.77$ 费米，而原子核中

1) E. E. Chambers and R. Hofstader, *Phys. Rev.*, **103**: 1454 (1956).

的粒子间的平均距离可由

$$\rho = l^{-3} \tag{39.3}$$

得出，其中 $l \approx 1.73$ 费米．由于 $l > 2r_p$（但不是大得太多），我们可以希望，研究以两体势相互作用的核子集合的性能，就能理解核的性质．我们当然将在这个假定下进行讨论，但必须记住：核理论的全部都取决于这个很基本的近似．

4. 电荷密度由其在原点的值的 90% 降到 10% 所经过的距离，定义为表面厚度 t，$t = 2a\ln 9$，对于在 ${}_{12}Mg^{24}$ 与 ${}_{82}Pb^{208}$ 之间的核，人们发现其值为

$$t \approx 2.4 \text{ 费米}. \tag{39.4}$$

我们必须强调指出，电子散射所测量的是质子分布，或者说是电荷分布，而物质分布不一定与它相同．由于核力可以伸展到电荷分布以外，因而，纯粹的核测量给出的均方半径一般总是略微大一点．

半经验质量公式

我们研究包含 A 个核子（N 个中子和 Z 个质子）的核的能量．根据 Weizsäcker 的建议[1]，在初步近似下，我们把原子核看作一个液滴．如果一个液滴中含的液体加一倍，那么凝聚能或结合能也加一倍．这一结果就是说核能必定有如下形式的项

$$E_1 = -a_1 A, \tag{39.5}$$

这叫作*核物质的大块性质*．当然，在总能量中还有许多别的项．核表面上的核子只被内部粒子所吸引，这导致了表面张力和表面能，它使结合能减小．如果 σ 为表面张力，则表面能可以写成

$$E_2 = 4\pi R^2\sigma = 4\pi r_0^2\sigma A^{\frac{2}{3}} \equiv a_2 A^{\frac{2}{3}}. \tag{39.6}$$

1) C. F. von Weizsäcker, *Z. Physik*, **96**: 431 (1935).

它正比于表面积 $A^{2/3}$. 还有 Z 个质子的库仑相互作用，假定电荷在半径为 $R_c \equiv r_{0c}A^{\frac{1}{3}}$ 的球内均匀分布，可以把这种相互作用近似地计算出来. 静电学中的初等积分给出 $(1/2)Z(Z-1)$ 个对偶的相互作用能为

$$E_3 = \frac{3}{5}\frac{Z(Z-1)e^2}{R_c} = \frac{3}{5}\frac{e^2}{r_{0c}}\frac{Z(Z-1)}{A^{\frac{1}{3}}}$$

$$\approx a_3\frac{Z^2}{A^{1/3}}. \tag{39.7}$$

现在还必须把某些核效应包括到能量中去. 首先，从经验上，我们注意到原子核的中子数和质子数，倾向于相等，即 $N = Z$. 这样，在质量公式中还需加上一项相应的对称能 E_4. 核物质的大块性质要求，在比值 N/Z 相同的情况下，粒子数加一倍，对称能也加一倍. 这个事实提示，E_4 与 A 成正比. 作为数字系数的初步近似，在平衡态附近的展开式中将只保留二次项，我们得到

$$E_4 = c\left(\frac{1}{2} - \frac{Z}{N+Z}\right)^2 A = \frac{c}{4A^2}(A-2Z)^2A$$

$$\equiv a_4A^{-1}(A-2Z)^2. \tag{39.8}$$

其次，从经验上我们注意到，原子核中同一类粒子的个数倾向于为偶数. 例如，只有 4 个稳定的奇-奇核，${}_1H^2$，${}_3Li^6$，${}_5B^{10}$ 和 ${}_7N^{14}$. 对于奇 A 核，最多只有一个稳定的同量异位素(即 A 相同的原子核)；而对于偶 A 核，则可以有两个或更多的偶 N 和偶 Z 的稳定的同量异位素. 由实验得出的能量面描述一系列同量异位素的情况，见图 39.2. 在这样的系列中，仅有的可能跃迁是由电子或正电子发射和电子俘获引起的. (从能量守恒直接得出一个一般规则是：在 Z 相差 1 而 A 相同的两个原子核中，至少有一个是 β 不稳定的.) 在同一能量面上两个相邻的偶-偶核可以都是稳定的. 因为在它们之间容许

的唯一跃迁是双 β 衰变，而人们相信这种衰变并不存在或者至少是极其少见的．加上如下形式的配对能

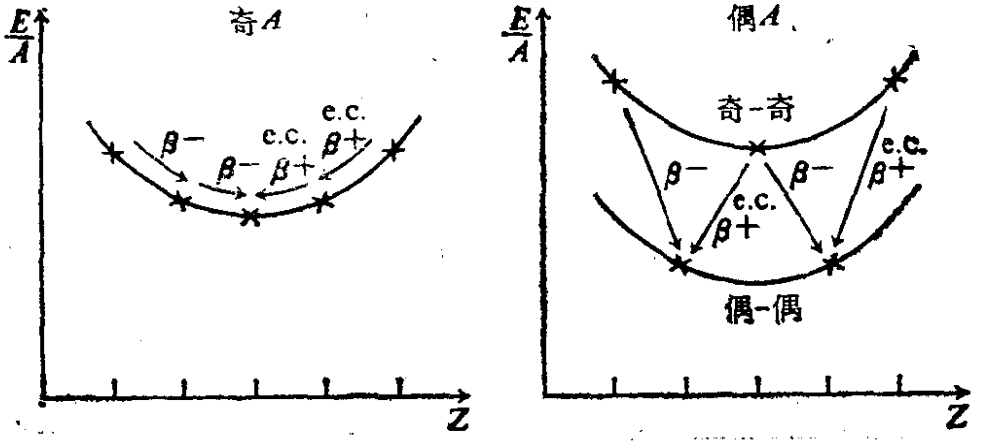


图 39.2　奇 A 和偶 A 能量面，图中表明，容许的 β 衰变 (e. c. 代表电子俘获)．

$$E_5 = \lambda a_5 A^{-\frac{3}{4}}, \tag{39.9}$$

可以把这些能量面的劈裂包括在质量公式之中．这里参数 λ 定义为

$$\lambda \equiv \begin{cases} +\quad (\text{奇-奇}) \\ 0\quad (\text{奇-偶}), \\ -1\ (\text{偶-偶}) \end{cases} \tag{39.10}$$

而对 $A^{-\frac{3}{4}}$ 的依赖关系则是经验结果．把以上这些结果合并在一起，便导致 Weizsäcker 半经验质量公式，

$$\begin{aligned} E = &-a_1 A + a_2 A^{\frac{2}{3}} + a_3 Z^2 A^{-\frac{1}{3}} \\ &+ a_4 (A - 2Z)^2 A^{-1} + \lambda a_5 A^{-\frac{3}{4}}, \end{aligned} \tag{39.11}$$

下列最佳拟合参数是由 Green[1)2)] 给出的

---

1) A. E. S. Green, *Phys. Rev.*, **95**: 1006 (1954); A. E. S. Green and D. F. Edwards. *Phys. Rev.*, **91**: 46 (1953).

2) 系数 a_3 隐含着 $r_{0c} = 1.22$ 费米[见方程(39.7)]，这与电子散射中测量出的有效值相符．

$$\begin{cases} a_1 = 15.75 \text{ 兆电子伏}, & a_4 = 23.7 \text{ 兆电子伏}, \\ a_2 = 17.8 \text{ 兆电子伏}, & a_5 = 34 \text{ 兆电子伏}. \\ a_3 = 0.710 \text{ 兆电子伏}, & \end{cases} \tag{39.12}$$

(39.11) 这个表示式只有两项与 Z 有关，即库仑能与对称能. 通过微分 $\left(\frac{\partial E}{\partial Z}\right)_A = 0$，可以求出稳定电荷 Z^*，它意味着

$$Z^* = A\left(2 + \frac{a_3 A^{\frac{2}{3}}}{2a_4}\right)^{-1}. \tag{39.13}$$

对于小的原子核，平衡值为 $Z^* \approx A/2$；直到 $A \approx 40$，这一结果确已被观察到. 明显地，这一表式并不能解释由壳层结构而引起的围绕这一平衡值的局部变化. 尽管如此，总的拟合还是非常好的.

在研究裂变中，方程 (39.11) 是很有用的，因为它使我们可以决定什么时候两个裂片的能量小于原来处于激发态的原子核的能量，直至使我们可以计算在裂变过程中释放出来的能量. 对于预言新的原子核的质量，它也是有用的.

现在我们可以定义一种叫做*核物质*的实体. 如果我们在方程 (39.11) 中令 $A \to \infty$，同时令 $N = Z$ 并且“消除”电荷，那么这核物质中平均每粒子的能量就是常数，它由下式给出

$$\frac{E}{A} \approx -15.7 \text{ 兆电子伏}. \tag{39.14}$$

因而这一数值代表一个具有相等的中子数和质子数，但无库仑效应的无限大原子核的每粒子的能量. 方程式 (39.14) 和 (39.2) 显示出*核力的饱和*，因为每一粒子的结合能与核密度都是与 A 无关的常数. 核物质是一个均匀的简并 Fermi 系统，可以用 Fermi 波数表示. 由于每一个动量态具有简并因子 4 (中子，质子，自旋向上，自旋向下)，粒子密度成为[参见方程 (5.47)]

$$\frac{A}{V}=\frac{2}{3\pi^2}k_F^3, \tag{39.15}$$

或者利用(39.2)得

$$k_F r_0=\left(\frac{9\pi}{8}\right)^{\frac{1}{3}}=1.52. \tag{39.16}$$

由方程(39.1)的 r_0 的实验值，可给出核物质的 Fermi 波数

$$k_F\approx 1.42 \text{ 费米}. \tag{39.17}$$

40. 独立粒子(Fermi 气体)模型

我们想要考察，前面在 $A\to\infty$ 的极限下所定义的核物质的大块性质. 对于一个均匀系统，采用一个体积为 V 的匣子，并应用周期性边界条件，是适当的. 这时，从平移不变性可得出，单粒子的本征函数是平面波

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})=V^{-\frac{1}{2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{40.1}$$

这些波函数已经是 Hartree-Fock 方程的解，它们是我们可以找到的“最佳”单粒子波函数(参阅第 10 节). 这一结果说明了核物质概念的吸引人和简洁. 开始时的单粒子波函数是已知的，而且是简单的. 而例如有限核或原子的情况就不是这样了. 对于它们，仅仅为了得到开始时的 Hartree-Fock 波函数就要进行很困难的计算[1].

这里的 Fermi 介质既包含质子，又包含中子，自旋可向上，也可向下. 我们知道，质子和中子具有相同的核相互作用，这就是说与电荷无关. 因而，把它们当作单一的粒子(核子)的两个不同的电荷态来处理，并引入同位旋的概念，这将

1) 有限核的理论将在第十五章中考虑.

是方便的. 这样,核子得到一个附加的自由度,它可以取两种值; 这两种值表明核子究竟是质子还是中子. 正如对 1/2 角动量那样,引人两分量的同位旋波函数

$$\zeta_p = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \zeta_n = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{40.2}$$

这些两分量矢量的空间中的算符是 $\mathbf{1}$ 和 $\boldsymbol{\tau}$, 这里 $\boldsymbol{\tau}$ 表示 Pauli 矩阵. 于是完全的单粒子波函数可以写成

$$\varphi_k(\mathbf{x})\eta_\lambda\zeta_\rho, \tag{40.3}$$

这里 η_λ 是通常的自旋波函数. 区分质子和中子的电荷算符由下式给出

$$q = \frac{1}{2}(1 + \tau_3). \tag{40.4}$$

完全象前面那样,可以引进二次量子化,正则反对易关系成为

$$\{a_{\mathbf{k}\lambda\rho}, a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\lambda'\rho'}\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\rho\rho'}. \tag{40.5}$$

这里的反对易关系是用推广的 Pauli 原理写出的: 在所有坐标(包括同位旋)的交换下,核子集体的态矢量或波函数必须是反对称的. 如果相互作用不引起中子-质子相互跃迁,那么方程 (40.5) 并不损害一般性,因为这时相应的算符究竟是对易的还是反对易的都无关系了. 如果相互作用可以引起这样的跃迁,则这一选择是重要的,到目前为止所发展的理论中都加上了方程 (40.5) 的反对易关系.

无相互作用的 Fermi 系统的哈密顿函数的期待值给出了核物质基态能量的第一级近似

$$E_0 + E_1 = \langle F|\hat{H}|F\rangle. \tag{40.6}$$

第一级近似的计算也是一种变分计算,因为变分原理表明

$$E \leqslant \langle F|\hat{H}|F\rangle. \tag{40.7}$$

我们先假定势是非奇异的,相应的期待值可以算出为

$$E_0 + E_1 = 4\sum_{\mathbf{k}}^{k_F}\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}_1\lambda_1\rho_1}\cdots\sum_{\mathbf{k}_4\lambda_4\rho_4}$$

$$\langle \mathbf{k}_1\lambda_1\rho_1\mathbf{k}_2\lambda_2\rho_2|V|\mathbf{k}_3\lambda_3\rho_3\mathbf{k}_4\lambda_4\rho_4\rangle$$

$$\times\langle F|a^\dagger_{\mathbf{k}_1\lambda_1\rho_1}a^\dagger_{\mathbf{k}_2\lambda_2\rho_2}a_{\mathbf{k}_4\lambda_4\rho_4}a_{\mathbf{k}_3\lambda_3\rho_3}|F\rangle. \tag{40.8}$$

(我们不久就要回到对奇异情况的讨论). 正如计算电子气那样,方程(40.8)的矩阵元中的所有算符都必须属于 Fermi 海中的粒子,否则矩阵元为零. 产生算符和消灭算符的矩阵元成为

$$\langle F|a^\dagger_{\mathbf{k}_1\lambda_1\rho_1}a^\dagger_{\mathbf{k}_2\lambda_2\rho_2}a_{\mathbf{k}_4\lambda_4\rho_4}a_{\mathbf{k}_3\lambda_3\rho_3}|F\rangle$$
$$= [\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\rho_1\rho_3}][\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_4}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\rho_2\rho_4}]$$
$$-[\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_4}\delta_{\lambda_1\lambda_4}\delta_{\rho_1\rho_4}][\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3}\delta_{\lambda_2\lambda_3}\delta_{\rho_2\rho_3}].$$

它给出

$$E_0 + E_1 = 4\sum_{k}^{k_F}\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{k\lambda\rho}^{k_F}\sum_{k'\lambda'\rho'}^{k_F}$$
$$\times\{\langle \mathbf{k}\lambda\rho\mathbf{k}'\lambda'\rho'|V|\mathbf{k}\lambda\rho\mathbf{k}'\lambda'\rho'\rangle$$
$$-\langle \mathbf{k}\lambda\rho\mathbf{k}'\lambda'\rho'|V|\mathbf{k}'\lambda'\rho'\mathbf{k}\lambda\rho\rangle\}. \tag{40.9}$$

这个基态能量的表式由图 9.22 中的头两个 Goldstone 图解表示.

作为例子,考虑一个由通常的有心力 (Wigner 力) 和 Majorana 空间交换力的任意组合所构成的势

$$V = V(x)[a_W + a_M P_M], \tag{40.10}$$

这里 a_W 和 a_M 为正的常数. 我们假定 $V(x)$是吸引的,非奇异的,并且,为了简单起见,假定它是与自旋无关的. 事实上,核子-核子力与自旋的关系是十分弱的; 象在第 38 节中所讨论的,$^1S_0$ 态刚刚是自由的,而 $^3S_1$ 态则刚刚是束缚的. 于是,直接矩阵元(E_1 的第一项)成为

$$V_D = V^{-2}\int d^3x \int d^3y e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}} \eta_\lambda^\dagger(1)\eta_{\lambda'}^\dagger(2)\zeta_\rho^\dagger(1)\zeta_{\rho'}^\dagger(2)$$
$$\times V(1,2) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}} \eta_\lambda(1)\eta_{\lambda'}(2)\zeta_\rho(1)\zeta_{\rho'}(2)$$
$$= V^{-1}\left[a_W\int V(z)d^3z + a_M\int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{z}} V(z)d^3z\right]. \quad (40.11\,a)$$

类似地，交换矩阵元（E_1 的第二项）由下式给出

$$V_E = V^{-2}\int d^3x \int d^3y e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}} \eta_\lambda^\dagger(1)\eta_{\lambda'}^\dagger(2)\zeta_\rho^\dagger(1)\zeta_{\rho'}^\dagger(2)$$
$$\times V(1,2) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \eta_{\lambda'}(1)\eta_\lambda(2)\zeta_{\rho'}(1)\zeta_\rho(2)$$
$$= V^{-1}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\rho\rho'}\left[a_W\int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{z}} V(z)d^3z\right.$$
$$\left. + a_M\int V(z)d^3z\right]. \quad (40.11\,b)$$

将这些表式代入方程 (40.9)，并把求和转换成积分，能量表示式成为

$$E_0 + E_1 = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}A + \frac{V}{2}\frac{1}{(2\pi)^6}\int^{k_F} d^3k \int^{k_F} d^3k'$$
$$\times\left\{16\left[a_W V(0) + a_M\int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{z}} V(z)d^3z\right]\right.$$
$$\left. - 4\left[a_M V(0) + a_W\int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{z}} V(z)d^3z\right]\right\}, \quad (40.12)$$

这里 $V(0) \equiv V(\mathbf{k}=0)$. 动量积分可以算出如下[1]：

$$\int^{k_F} d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = 4\pi\int_0^{k_F} k^2 j_0(kx)dk$$
$$= \frac{4\pi k_F^3}{3}\cdot\frac{3j_1(k_F x)}{k_F x}. \quad (40.13)$$

最后，体积和粒子数之间的关系[方程 (39.15)]使我们可以将能量改写成

---

1) 参阅 L. I. Schiff, 前引书, p.86.

$$\frac{E_0+E_1}{A}=\frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}+\frac{k_F^2}{12\pi^2}\left\{(4a_W-a_M)\int V(z)d^3z\right.$$
$$\left.+(4a_M-a_W)\int\left[\frac{3j_1(k_Fz)}{k_Fz}\right]^2V(z)d^3z\right\}. \quad (40.14)$$

当 $k_F\to\infty$，第二个积分中的被积函数几乎处处趋于零，这样可以期望第一项在高密度下起主要作用.对于吸引势，系集将由此坍塌，也就是，随着 k_F 的增加，能量将变得越来越负，只有力的系数满足如下不等式

$$a_M>4\,a_W, \quad (40.15)$$

才能阻止这种坍塌. 对于这里的非奇异势，方程(40.15)是交换力在奇角动量态提供足够的排斥力的一个必要条件[见方程 (40.10) 和(38.19)]. 如果这个不等式不满足，那么在高密度下，和动能相比，势能将总是占优势的，因为势能按 k_F^3 而变化，而动能则按 k_F^2 而变化. 这样，当密度增加时，真实的基态能量将变得越来越负. 特别是，实验上得到的核子-核子力，粗略地说来具有 Serber 力的特性[参阅方程(38.20)]，其中

$$a_W\approx a_M \quad (\text{实验}). \quad (40.16)$$

很清楚，对于非奇异的 Serber 力，饱和现象不可能发生.

可以按如下方式定义单粒子势:

$$U_{\lambda\rho}|(\mathbf{k})\equiv\hbar\Sigma^{\star}_{(1)}(\mathbf{k})=\sum_{k',\lambda',\rho'}^{k_F}\{\langle\mathbf{k}\lambda\rho\mathbf{k}'\lambda'\rho'|V|\mathbf{k}\lambda\rho\mathbf{k}'\lambda'\rho'\rangle$$
$$-\langle\mathbf{k}\lambda\rho\mathbf{k}'\lambda'\rho'|V|\mathbf{k}'\lambda'\rho'\mathbf{k}\lambda\rho\rangle\}. \quad (40.17)$$

这个量代表处于态 $|\mathbf{k}\lambda\rho\rangle$ 的一个粒子与填满的 Fermi 海中的所有其他粒子的第一级相互作用能量;它就是通常的 Hartree-Fock 势. 它也可以解释为图 11.3 头两个图解所给出的单粒子 Green 函数的最低级正规自能对于自旋和同位旋这两种指标的对角矩阵元(参阅第 11 节的讨论). 有关的矩阵元已在

方程(40.11)中算出，我们求得

$$U(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int^{k_F} d^3k' \Big\{ 4\Big[a_W \int V(z) d^3z + a_M \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{z}} V(z) d^3z\Big] - \Big[a_M \int V(z) d^3z + a_W \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{z}} V(z) d^3z\Big]\Big\}. \tag{40.18}$$

它与自旋和同位旋无关．对角度的积分可以象以前一样地完成:

$$U(\mathbf{k}) = \frac{k_F^3}{6\pi^2}\Big[(4a_W - a_M)\int V(z) d^3z + (4a_M - a_W) \times \int j_0(kz) \frac{3j_1(k_F z)}{k_F z} V(z) d^3z\Big]. \tag{40.19}$$

动量很小时，出现于交换积分中的球 Bessel 函数可以展开为

$$j_0(kz) = 1 - k^2z^2/6 + \cdots.$$

对于很小的 k，这导致抛物型单粒子势

$$U(\mathbf{k}) \approx U_0 + \frac{\hbar^2k^2}{2m} U_1 + \cdots (k \to 0). \tag{40.20}$$

由于这里能量依赖于动量的平方，因而可用下式定义有效质量，

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^0 + U(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2k^2}{2m}(1 + U_1) + U_0 \equiv U_0 + \frac{\hbar^2k^2}{2m^*}, \tag{40.21}$$

其中

$$\frac{m}{m^*} = 1 + U_1. \tag{40.22}$$

在这里的 Hartree-Fock 近似下，$U(\mathbf{k})$ 对动量的依赖关系和有效质量改正完全来源于直接力 V_W 的交换项和交换力 V_M 的直接项.

在 k 很大的相反极限下，球 Bessel 函数振荡得很快，从而交换积分为零. 其结果是单粒子势的渐近表示式成为

$$U(\mathbf{k}) \to \frac{k_F^3}{6\pi^2}(4a_W - a_M)\int V(z)d^3z \quad (k \to \infty). \tag{40.23}$$

所得的单粒子势的示意图为图 40.1. 注意 $U(\mathbf{k})$ 自动包括了 Pauli 原理，因为在态 $|\mathbf{k}\lambda\rho\rangle$ 上的粒子已经和介质中所有其他粒子一起反对称化了. 如果 $k < k_F$，则 $U(\mathbf{k})$ 表示实际出现在 Fermi 海中的核子间的相互作用. 相反地，如果 $k > k_F$，则 $U(\mathbf{k})$ 表示核物质中一个附加核子的作用势；这个量刚好是附加粒子所受到的光频势，其中适当地考虑到交换效应的可能性.

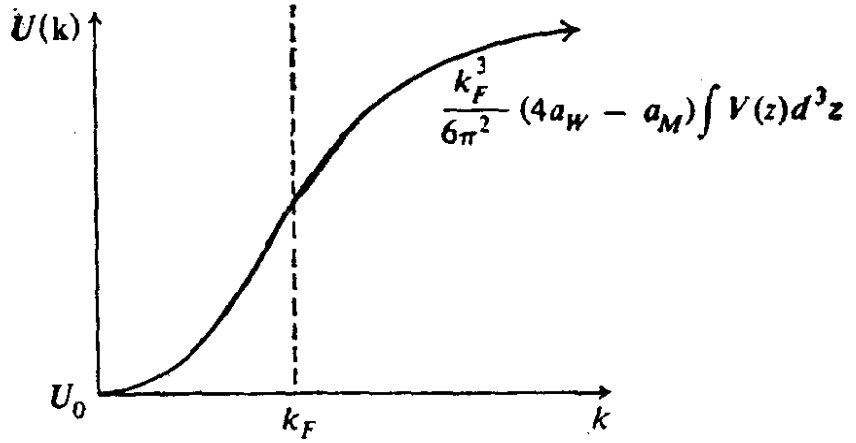


图 40.1 方程 (40.19) 的单粒子势 $U(\mathbf{k})$ 的示意图. 参见方程 (40.23).

到这里为止，我们假定了具有 Serber 交换性质的非奇异的核子-核子力，并在相互作用的最低一级计算了基态能量的移动. 这一结果是很有作用的，因为它给出了真正的基态能量的变分界，并且表明，用这样一个 Serber 力，系集是不稳定

的，有可能坍塌．我们现在面对两个问题．首先，怎样解释核饱和现象？回答是：我们曾假定势是非奇异的，而核力实际上是奇异的．正如在第 38 节中所看到的，有证据表明，存在着短程的强排斥力，它必须包括到计算中去．第二个问题是：如何理解核的独立粒子模型所取得的成功．很清楚，奇异的核力引进重要的相关性．然而，原子核的单粒子壳层模型的许多成就，以及通过单粒子光频势对散射作出准确描述，这些表明独立粒子模型常常是核物理中的一个很好的起始近似．在第 41 节中，我们将试图用独立对偶近似来回答这些问题，在那里将详细地处理两体相关性．

41. 独立对偶近似 (Brueckner 理论)[1)2)]

两个核子间的力是奇异的．这一点至关重要，因为它意味着核势对两体波函数有一种根本的影响，象在第 11 节中所详细讨论过的那样．在用图解表示时，我们必须保留图 11.3 所表示的对正规自能的梯形贡献，以及对基态能量的相应贡献．为简单起见，本节将用 Bethe-Goldstone 方程来描述相互作用粒子对偶，这个方程包含了问题的全部基本的物理特点．在第 42 节中，我们将讨论其与 Green 函数的关系以及与第 11

---

1) K. A. Brueckner, C. A. Levinson, and H. M. Mahmoud, *Phys. Rev.* **95**: 217 (1954); H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **103**: 1353 (1956); K. A. Brueckner and J.L. Gammel, *Phys. Rev.* **109**: 1023 (1958); K. A. Brueckner, Theory of Nuclear Structure, in C. DeWitt (ed.), "The Many Body Problem", P. 47. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1959.

2) 这里用独立对偶近似对 Brueckner 理论所进行的讨论是基于 L. C. Gomes, J. D. Walecka, and V. F. Weisskopf, *Ann. Phys.* (*N.Y.*), **3**: 241 (1958) 和 J. D. Walecka and L. C. Gomes. *Ann. da Acad Brasileira de Ciências* **39**: 361 (1967).

节中的 Galitskii 方程的关系.

自洽 Bethe-Goldstone 方程[1)]

在第 36 节中我们研究了 Fermi 海中两个相互作用核子的 Bethe-Gddstone 方程. 基本的近似是，集中研究所考虑的两个粒子，而完全忽略这些粒子与 Fermi 海中其他粒子间的相互作用. 这样一种图象显然是不完全的，我们现在计及有效粒子势以修订相互作用粒子对偶的能量，有效单粒子势来自它与所有其他粒子的相互作用. 这样，动能 ε_k^0 就用 $\varepsilon_k =$

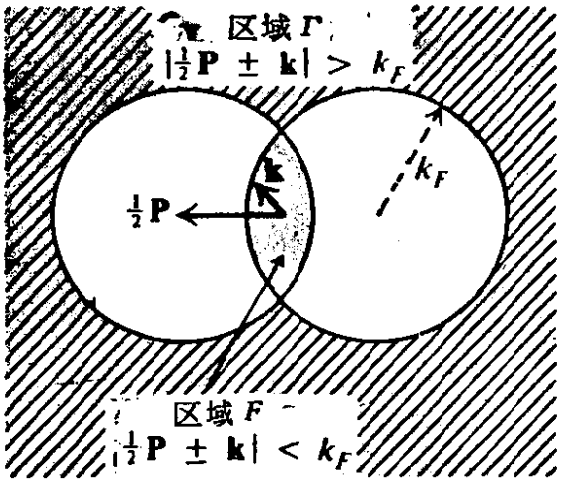


图 41.1 Bethe-Goldstone 方程中的动量区域

$\varepsilon_k^0 + U(\mathbf{k})$ 来代替，Bethe-Goldstone 方程 (36.4)，(36.5) (36.15) 和 (36.16) 成为

$$\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(x) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \int_\Gamma \frac{d^3t}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{t}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{E_{\mathbf{P},\mathbf{k}} - \varepsilon_{\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{t}} - \varepsilon_{\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{t}}}$$

$$\times \int d^3y e^{-i\mathbf{t}\cdot\mathbf{y}} V(y)\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(y) \qquad (41.1)$$

$$\left(F \equiv \left|\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{k}\right| < k_F,\ \Gamma \equiv \left|\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{t}\right| > k_F \right),$$

1) H. A. Bethe and J. Goldstrone, *Proc. Roy. Soc* (*London*), **A 238**: 551 (1957).

$$\Delta\epsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}} \equiv E_{\mathbf{P},\mathbf{k}} - \epsilon_{\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{k}} - \epsilon_{\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{k}}$$
$$= V^{-1}\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} V(x)\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \qquad (41.2)$$

这里动量空间中应排除的区域(被其它核子所占据的区域)示于图 41.1. 这些方程现在包含着一个未知的函数 $U(\mathbf{k})$，它将由粒子间势 $V(x)$ 和二体波函数 $\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(x)$ 自洽地定出. 势 $V(x)$ 将取作是与自旋和同位旋无关的，但这不是一个实质性的限制.

考虑一个象方程(41.1)中的那种由质心动量 $\hbar\mathbf{P}$ 和相对动量 $\hbar\mathbf{k}$ 所表征的核子对偶. 两个核子间的相互作用出现在 Fermi 海上方的两粒子态之间，这造成由方程 (41.2) 所给出的两粒子能量的相应移动. 在独立对偶近似中，整个系统的总能量移动，可以通过对 Fermi 海中所有粒子对偶的能量移动求和而得出. (对于两个全同粒子，例如 $p\uparrow$ 和 $p\uparrow$，方程(41.1)中的波函数当然必须反对称化.)独立对偶近似具有这样的特点，它自动地给出相互作用 Fermi 系统的能量移动，准确到势的第二级. 这一结果从图 9.22 来看是明显的，因为在基态能量中没有别的第二级项(见第 9 节和第 42 节的讨论). 此外，Bethe-Goldstone 方程使得可能计及势对波函数的影响，直到一切级. 方程 (41.1) 仍然是波函数的一个积分方程，且势仅仅出现在组合 $V\psi$ 中，而 $V\psi$ 甚至对于奇异势也是有确定意义的.

为了简化讨论并且对问题的物理方面取得一些较深的认识，我们将假定

$$U(\mathbf{k}) \approx U_0 + \frac{\hbar^2k^2}{2m}U_2,$$

并采用有效质量近似. 从图 40.1 中看到，在谱的有限制的区域内，这是一个好的近似，但它不可能对 k 的一切值都正确. 因而单粒子能量成为

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} U_1$$

$$\approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + U_0. \tag{41.3}$$

尽管这一近似导致很大的简化，但它仍然包括自洽的要素，因为 m^* 通过方程 (41.1) 影响到两体波函数. 这样它改变了单粒子谱 $U(\mathbf{k})$，后者是作为态 $|\mathbf{k}\lambda\rho\rangle$ 上的一个粒子与所有其他粒子的总相互作用能算出来的. 在方程 (41.1) 和 (41.2) 中，常数势 U_0 总是被消去了，因为这些关系式仅仅涉及能量差. 在有效质量近似下，自洽的 Bethe-Goldstone 方程归结为第 36 节所研究过的那些方程[方程 (36.15) 和 (36.15)]，但相互作用势现在由下式给出

$$v(x) = 2m^*_{\mathrm{red}}\hbar^{-2}V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|), \tag{41.4}$$

这里 $m^*_{\mathrm{red}} = m^*/2$ 是约化有效质量.

方程 (41.2) 中的 Bethe-Goldstone 方程所给出的能量移动按 V^{-1} 变化. 由于方程(36.15)的分母中的 $\kappa^2 - t^2$ 除了在接近 Fermi 面的地方以外不可能为零，所以我们可以在波函数方程中作替换 $\kappa^2 \to k^2$. 对于 Fermi 海深处的粒子这一近似实质上是严格正确的；但是正如我们在讨论 Cooper 对偶时所看到的，在接近 Fermi 面的地方，它可能是不正确的. 确实，正是方程(36.15)分母中 κ^2 的出现导致了具有非寻常解(束缚 Cooper 对偶)的本征值方程. 在第 43 节中，我们将说明核物质中的能隙 Δ 是很小的[1]. 由于这个原因，在讨论核物质的结

---

1) 这与金属中情况相似，在那里 $\Delta/k_B \approx 10\ \mathrm{K}$，$\varepsilon_F/k_B \approx 10^4\mathrm{K}$. 尽管如此，这两个系统还是有着根本差别的，因为我们在这里关心的是要绝对地确定核物质的大块性质，而不是只要求出方程(37.53)中所计算出的那种非常小的能量差 $E_s - E_n$. 这个态度上的差别反映了这样的物理事实：正常与超导金属之间的跃迁是容易观察到并加以研究的，但甚至还找不到明显的方法以确定一个原子核是处于正常态还是超导态.

合能和密度时，可以放心地忽略出现束缚对的可能性.

我们现在将研究 Bethe-Goldstone 方程的解. 有效质量近似使我们得以应用算符 $\nabla^2 + k^2$ 把积分方程 (41.1) 变成微分方程:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{x}) = \int_\Gamma \frac{d^3t}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{t}\cdot\mathbf{x}} \int d^3y e^{-i\mathbf{t}\cdot\mathbf{y}} v(y)\psi(y)$$

$$= v(x)\psi(x) - \int_{\bar{\Gamma}} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{t}\cdot\mathbf{x}}$$

$$\times \int d^3y e^{-i\mathbf{t}\cdot\mathbf{y}} v(y)\psi(y). \qquad (41.5)$$

这里 $\bar{\Gamma}$ 是图 41.1 中区域 Γ 的补余区域 ($\bar{\Gamma}$ 定义为区域

$$\left|\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{t}\right| < k_F$$

的并集). 我们从最简单的情形 ($\mathbf{P} = 0$) 开始，寻找这个方程的 s 波解，

$$\psi(x) = x^{-1}u(x). \qquad (41.6)$$

能穿透到相对距离很小的解只有 s 波解，在这种小距离上，奇异势影响最强. 以方程 (41.6) 代入方程 (41.5) 给出

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)u(x) = v(x)u(x)$$

$$- \int_0^\infty \chi(x, y)v(y)u(y)dy, \qquad (41.7)$$

这个 s 波 Bethe-Goldstone 方程中出现的积分核由下式给出:

$$\chi(x, y) = \frac{2xy}{\pi}\int_0^{k_F} j_0(tx)j_0(ty)t^2 dt,$$

$$= \frac{1}{\pi}\left[\frac{\sin k_F(x - y)}{x - y} - \frac{\sin k_F(x + y)}{x + y}\right]. \qquad (41.8)$$

非奇异方阱势的解

作为初步近似，我们考虑一个非奇异的方阱势，它与低能

$^1S_0$ 散射相拟合．我们的近似势示意地画于图 41.2．依照前面的讨论，其参数要由自由空间中相互作用的两个核子的性能

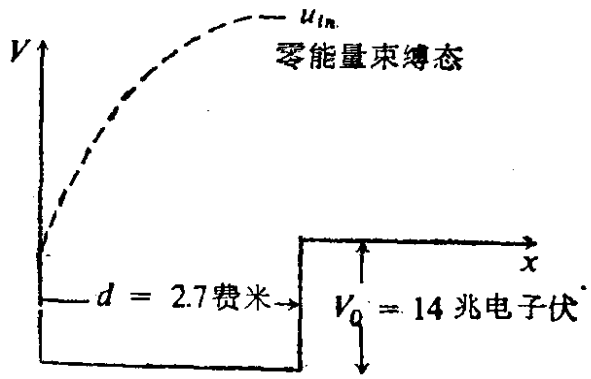


图 41.2　与低能 $^1S_0$ 散射相拟合的非奇异方阱势．

来决定．在零能量下，在势阱内的相对波函数由下式给出

$$u_{in}(x) \propto \sin\left[(2m_{\mathrm{red}}V_0\hbar^{-2})^{\frac{1}{2}}x\right].$$

由于 $^1S_0$ 势有一个束缚态的能量基本上为零，势阱内部必定恰好有四分之一波长（见图 41.2），这就提供如下条件

$$(2m_{\mathrm{red}}V_0\hbar^{-2})^{\frac{1}{2}}d = \frac{1}{2}\pi.$$

利用自由核子约化质量 $m_{\mathrm{red}} = m/2$，可把这一结果改写成

$$V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{4md^2}. \tag{41.9}$$

此外，如果方阱具有零能量束缚态，则有效力程等于势的作用范围（见习题 11.1）．

$$r_0 = d \quad (\text{有效力程}). \tag{41.10}$$

我们用从 p-p 散射数据得出的单态有效力程[1]

$$^1r_0 = 2.7 \text{ 费米}, \tag{41.11}$$

非奇异方阱势的深度就成为

$$V_0 = 14 \text{ 兆电子伏}. \tag{41.12}$$

---

1) M. A. Preston, 前引书 P. 33

注意，我们的近似核势实际上是很弱的

$$V_0 \ll \varepsilon_F^0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = 42 \text{ 兆电子伏} \qquad (41.13)$$

这里 ε_F^0 是用方程(39.17)所给出的适合于核物质的 Fermi 动量算出来的.

在非奇异方阱势的特例中，直接从方程 (41.1) 计算波函数的变化 $\Delta\psi$，比从方程(41.7)计算较为容易. 考虑 $k \to 0$ 的极限，先假定 $\Delta\psi$ 是很小的. 于是在方程(41.1)的右端可置

$$\psi(x) = x^{-1}u(x) \approx j_0(kx) \to 1 \quad (k \to 0); \qquad (41.14)$$

波函数的相应修改由下式给出

$$\Delta\psi = \lim_{k\to 0}\left[\frac{u(x)}{x} - j_0(kx)\right] = \frac{u(x)}{x} - 1$$

$$= \frac{2v_0}{\pi}\int_{k_F}^{\infty} dt\, j_0(tx)\int_0^d j_0(ty)y^2 dy. \qquad (41.15)$$

对 y 的积分可以计算出来

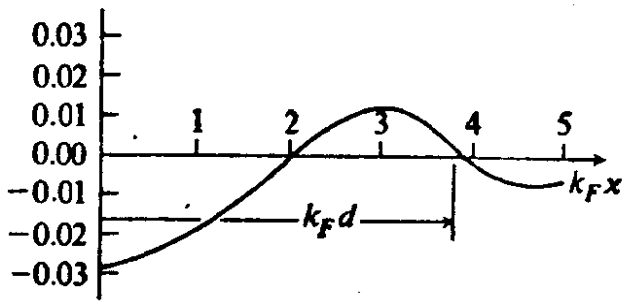


图 41.3 图 41.2 的势所引起的 s-波两体波函数的修改 $\Delta\psi_{sw}$ [方程 (41.17)]. 这一计算是对核物质中 $\mathbf{k} = \mathbf{P} = 0$ 的核子对偶进行的.

$$\int_0^d j_0(ty)y^2 dy = d^3\frac{j_1(td)}{td}. \qquad (41.16)$$

这样，由非奇异方阱势所引起的波函数的修改是

$$\Delta\psi_{sw} = \frac{2v_0}{\pi k_F^2}(k_F d)^2\int_{k_F d}^{\infty}\frac{d\rho}{\rho} j_1(\rho)j_0\left(\rho\frac{x}{d}\right), \qquad (41.17)$$

这里引入了无量纲的积分变数，而 $k_F d = 3.8$. 无量纲势由下式给出

$$\frac{v_0}{k_F^2} = \frac{V_0}{\hbar^2 k_F^2 / 2m_{\rm red}^*} = \frac{m^*}{m} \frac{\pi^2}{4(k_F d)^2}$$

$$= 0.17 \frac{m^*}{m} \approx 0.10, \qquad (41.18)$$

这里我们用了数值 $m^*/m = 0.6$，这数值将在下面导出. 这一计算的主要结果是

$$\Delta\psi_{SW} \ll 1. \qquad (41.19)$$

因此吸引势对于两粒子波函数 $u(x)/x = 1 + \Delta\psi$ [见方程(41.15)] 几乎没有影响. 有两个理由可以说明这一性质. 首先，Fermi 动量是很大的，这使得非奇异势不容易把粒子从 Fermi 海中激发出来；其次 $m^*/m < 1$. 方程(41.17)中的函数 $\Delta\psi_{SW}$ 和方阱势本身的作用范围一起绘于图 41.3 中. 我们看到势所引起的关联是振荡的，其波数约为 k_F，这种关联在大距离按 x^{-2} 衰减. 总之，核子-核子力的长程吸引部分，对两粒子波函数几乎没有影响；引起波函数的修改的倒是刚性核，加上紧接在刚性核外的强短程吸引势[1].

纯刚性核势的解

Bethe-Goldstone 方程也可以对纯刚性核势来求解，Bethe 和 Goldstone 原来就是这么作的[2]. 先用无量纲变数来改写方程(41.7)和(41.8)将是方便的，

$$r = k_F x, \quad r' = k_F y, \quad K = \frac{k}{k_F}, \qquad (41.20)$$

---

1) 到此为止，仅只考虑了 $^1S_0$ 吸引阱. 事实上，对于这里的核物质的分析，这已经足够了[见方程(41.39)后面的讨论].

2) H. A. Bethe and J. Goldstone, 前引文.

$$v(r)=\frac{v(x)}{k_F^2}=\frac{V(x)}{\hbar^2k_F^2/2m^*_{\rm red}},\quad u(r)=k_Fu(x).$$

这给出

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+K^2\right)u(r)=v(r)u(r)$$

$$-\int_0^\infty\chi(r,r')v(r')u(r')dr',\quad(41.21)$$

$$\chi(r,r')=\frac{1}{\pi}\left[\frac{\sin(r-r')}{r-r'}-\frac{\sin(r+r')}{r+r'}\right].\quad(41.22)$$

如图 41.4 所表明，刚性核在(无量纲的)距离 c 处引起了波函数斜率的不连续．研究一个有限高度的势垒，然后使势垒的高度变为无限大，容易验证这一结果（见习题 11.5)．由于在无限高的势内部，波函数必须为零，于是积 vu 可以写作

$$v(r)u(r)=\mathscr{A}\delta(r-c)+w(r)\theta(c-r).\quad(41.23)$$

这里第一项给出了波函数的斜率在核边界上的有限不连续值，把 Bethe-Goldstone 方程 (41.5) 跨越核边界积分就可以看出这一点．余下的一项 $w(r)$ 在核外不可能有贡献，在那里势为零．但是由于极限过程 $v\to\infty$，$u\to0$，在核区域内它可以是有限的．这个额外的“泄漏”项必须选择得使

$$u''+K^2u=0\quad(r<c).\quad(41.24)$$

把方程 (41.23) 和 (41.21)结合起来，方程 (41.24) 的条件就成为

$$\mathscr{A}^{-1}w(r)=\chi(r,c)+\mathscr{A}^{-1}\int_0^c\chi(rr')w(r')dr'$$

$$(r<c).\quad(41.25)$$

只要注意到无量纲常数 c 是很小的，余下的分析就可简化．例如，在所观察到的核物质密度下，

$$c=1.42\text{ 费米}^{-1}\times0.4\text{ 费米}=0.57,\quad(41.26)$$

这里假定了一个力程为 0.4 费米的刚性核. 在它的两个宗量都很小的极限下，s 波 Bethe-Goldstone 方程的积分核成为

$$\chi(r, r') \to \frac{2rr'}{3\pi}. \quad (r < c, r' < c) \tag{41.27}$$

方程 (41.25) 表明 $w(r)$ 是 c^2 的数量级，而对 $w(r)$ 的任何积分都是 c^3 的数量级. 因而，在 c 很小时，方程 (41.23) 中的泄漏可以忽略，(41.21) 和 (41.23) 的结合给出

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + K^2\right) u(r) \approx \mathscr{A}[\delta(r-c) - \chi(r, c)]$$

$$= \mathscr{A}\frac{2rc}{\pi}\int_1^\infty j_0(tr) j_0(tc) t^2 dt$$

$$\equiv F(r), \tag{41.28}$$

这定义了 $F(r)$. 很显然，$\chi(r, c)$ 可用来与 $\delta(r-c)$ 的 Fermi 球内的各个 Fourier 分量抵消 [参见方程 (41.8)]. 这个方程的右边是 r 的已知函数，而唯一的未知量是归一化常数 $\mathscr{A}$. 由于 $u(0) = 0$，这个方程的一般解由下式给出

$$u(r) = \frac{1}{K}\int_0^r \sin[K(r-s)] F(s) ds. \tag{41.29}$$

因为从方程 (41.29) 很容易直接验证，

$$u''(r) + K^2 u(r) = F(r). \tag{41.30}$$

如果把方程 (41.29) 右边的正弦函数用三角恒等式展开，则 s 波 Bethe-Goldstone 方程的解成为

$$u(r) = \frac{\sin Kr}{K}\int_0^r \cos Ks F(s) ds$$

$$- \frac{\cos Kr}{K}\int_0^r \sin Ks F(s) ds, \tag{41.31}$$

这里 F 取自方程 (41.28).

我们现在要证明一个重要结果

$$\int_0^\infty \sin KsF(s)ds = 0. \tag{41.32}$$

这可以直接由方程 (41.28) 中 $F(s)$ 的具体形式得到

$$\frac{1}{K}\int_0^\infty ds \sin KsF(s) = \frac{2\mathscr{A}c}{\pi}\int_1^\infty dtt^2 j_0(tc)\int_0^\infty dss^2 j_0(Ks)j_0(ts)$$

$$= \frac{2\mathscr{A}c}{\pi}\int_1^\infty dtt^2 j_0(tc)\frac{\pi}{2Kt}\delta(K-t)$$

$$= 0. \tag{41.33}$$

因为，如图 41.1 所示，t 在 Fermi 球外，而 K 在 Fermi 球内，所以最后那个积分为零. 上面的推导表明，Fermi 海被填满是很重要的，因为只有这样，才能从中间态中除去 $t<1$ 的各个成分. 很显然，这一结果是很普遍的，可从方程 (41.5) 右边的形式得出. 方程 (41.32) 保证，严格解 $r^{-1}u(r)$ [方程 (41.31)] 在 $r\to\infty$ 时正比于未微扰解 $j_0(Kr)$，从而 s 波相移为零. 如果波函数在一个体积为 V 的匣子内归一化，那么，当相对坐标变大时，它必须趋于一个振幅为 1 的平面波:

$$\psi(\mathbf{x}) \to e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (x\to\infty). \tag{41.34}$$

从这个条件可推出

$$u(x)/x = u(r)/r \to j_0(Kr) \quad (r\to\infty).$$

而方程 (41.31) 的 s 波归一化条件成为

$$\int_0^\infty \cos KsF(s)ds = 1. \tag{41.35}$$

以方程 (41.28) 的右边代入，我们得到总的归一化常数 $\mathscr{A}$，

$$\mathscr{A} = \left[\cos Kc - \int_0^\infty \cos Ks\chi(s,c)ds\right]^{-1}. \tag{41.36}$$

方程 (41.28)，(41.31) 和 (41.36) 完全决定了稀薄硬球集体的 s 波相对波函数. 一个典型情况绘于图 41.4. 这一结果显示出几个有意义的特点. 如所预期，相对波函数在刚性核

表面上为零，然后很快地趋于未微扰值 1．并在大约为

$$k_F x \approx 1.9 \quad \text{（恢复距离）} \tag{41.37}$$

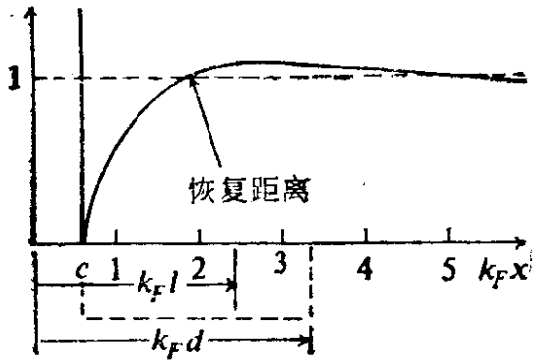


图 41.4　核物质中通过刚性核势相互作用的 $\mathbf{k}=\mathbf{P}=0$ 的 s 波对偶的 Bethe-Goldstone 波函数[方程 (41.31),(41.28) 和(41.36)]方程.(41.31)中的积分下限取作 c，因而 $u(c)\equiv 0$. 无相互作用对偶的波函数用虚线表示，交叉点定义了恢复距离，还标明了平均核子间距 $k_F l$ [方程 (41.38)] 和图 41.5 中势的作用范围 $k_F = d$.

的“恢复距离”越过未微扰值．研究方程(41.5)所引出的较一般的表示式[见方程 (41.7) 和 (41.62)]，我们可以证明，这个恢复距离实质上与 k 和 P 无关[1]．此外，由

$$\Delta\psi_c = u(r)/r - j_0(Kr)$$

所定义的相关函数也几乎与 k 和 P 无关．在越过恢复距离后，Bethe-Goldstone 波函数在未微扰解周围振荡，随着 $k_F x \to \infty$，它按阻尼振荡逼近于未微扰解．由表示式

$$\frac{1}{l^3} \equiv \frac{N}{V} = 2k_F^3/3\pi^2$$

所定义的核物质中平均粒子间距，也表示在图 41.4 中．表征核物质中粒子间距的相应的无量纲参数成为

$$k_F l = \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{1/2} = 2.46. \quad \text{（粒子间距）} \tag{41.38}$$

---

1) J. D. Walecka and L. C. Gomes, 前引文.

我们还要指出一个有意义的结果，如图 41.4 所示，方程(41.37)的恢复距离小于方程(41.38)的粒子间距．当两个相互碰撞的粒子之一达到另一个相邻粒子时，原来相互作用着的粒子对偶的波函数的“创伤”已经“治愈”，恢复到它的平面波值．对于随后的碰撞，可以再次假定相互碰撞的粒子从相对平面波态互相接近．这个结果证明，独立对偶近似是合理的．

这些事实也为核物质的独立粒子模型提供一个简单的定性基础．Pauli 原理抑制了刚性核所引起的相关性，并把它的影响限制在短距离内．特别是，刚性核不能导致长程散射，因为所有可用的能量守恒的态都已被占据．因而，除了短程的相关性以外，可以认为，核子在平面波态穿过核物质而运动．在解释独立粒子模怎样能够描述处于基态或接近基态的稀薄的强相互作用 Ferni 系统时，不相容原理起决定性作用，这是 Weisskopf 首先着重指出的[1]．

具有“真实”势的核物质的性质

我们现在把上述各种结果合并起来，研究核物质的一个

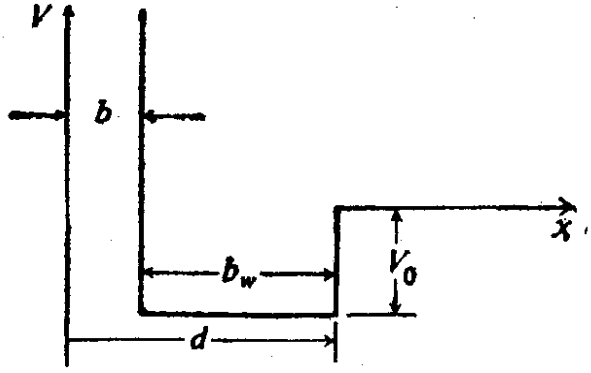


图 41.5　刚性核方阱势

1) V. F. Weisskopf, *Helv. Phys. Acta*, **23**: 187 (1950); *Science*, **113**: 101 (1951).

较为真实的模型. 在这个模型里，两核子势由刚性核加上方阱吸引势构成，如图 41.5 所示. 这个势把第 38 节所讨论的真实核子-核子力作了严重的过分简化；因而它只能对核物质的性质提一个定性的，或者最好也不过是半定量的描述. 这个模型势由下式给出：

$$V=\begin{cases}+\infty & (r<b),\\ -V_0\dfrac{1}{2}(1+P_M) & (b<r<b+b_W),\\ 0 & (b+b_W<r),\end{cases}\tag{41.39}$$

并在一切态中具有一个刚性核（我们将在奇 l 态就存在刚性核和不存在刚性核的两种情形计算核能），并且有一个 Serber 吸引力，如图所示. 我们这里忽略了 $^1S_0$ 势和 $^3S_1$ 势的差别. 如果这种差别来源于张量相互作用（这在例如单 π 介子交换势中是正确的），可以证明这种忽略是合理的. 在没有相互作用的费米气体中，Serber 交换型的张量力的基态期待值为零，这是由于张量算符 $\dfrac{1}{4}tr_1tr_2S_{12}$ 的自旋平均值为零，而且没有交换矩阵元. 这样，在核物质中，张量力的影响就大大地减弱了.

方程 (41.39) 所表示的势，它具有零能量束缚态的条件，容易导出为

$$V_0=\frac{\hbar^2\pi^2}{4mb_W^2}.\tag{41.40}$$

它又一次地保证正确的 $^1S_0$ 散射长度. 此外，对于这种具有零能量束缚态的势，有效力程 r_0 由下式给出(见习题 11.1)：

$$r_0=2b+b_W.\tag{41.41}$$

对于力程为 0.4 费米的刚性核，刚性核-方阱组合势的参数成为

$$b_W=1.9\text{ 费米},\quad b=0.4\text{ 费米},\tag{41.42}$$

而势的总力程 d 则为下式所表征

$$k_F(b + b_W) \equiv k_F d = 3.27. \tag{41.43}$$

如图 41.4 所示. 从前面的讨论清楚地看到，这个势的吸引部分又是对波函数影响不大，只是倾向于使波函数的值在势的内部稍有增强. 其结果是，相关函数 $\Delta\psi$ 实质上就是只有刚性核的相关函数，属于图 41.4 所示的类型.

为了计算核物质中一对核子的相互作用能量，我们将用 Bethe-Goldstone 方程 (41.2) 计算能量移动 $\Delta\epsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}}$

$$\Delta\epsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}} = V^{-1}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}(V_a + V_c)\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x})d^3x, \tag{41.44}$$

这里 V_a 是方程 (41.39) 中的势的吸引部分，而 V_c 则是刚性核. 在独立对偶近似中，单粒子势和系统总能量通过如下关系式从 $\Delta\epsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}}$ 定出

$$U(\mathbf{k}_1\lambda_1\rho_1) = \sum_{\mathbf{k}_2\lambda_2\rho_2}^{kF} \Delta\epsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}}, \tag{41.45}$$

$$\Delta E = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}_1\lambda_1\rho_1}^{k_F}\sum_{\mathbf{k}_2\lambda_2\rho_2}^{k_F} \Delta\epsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}}, \tag{41.46}$$

这里求和遍及于 Fermi 球的内部. 理论的自洽性现在已经十分显然，因为出现在方程 (41.1) 和 (41.2) 中的单粒子能量 $\epsilon_{\frac{1}{2}\mathbf{P}\pm\mathbf{k}}$ 是用方程 (41.44) 和 (41.45) 计算出来的.

由于刚性核对于解的决定起着最重要的作用，因而采用纯刚性核问题中导出的波函数

$$\psi \approx \psi_c \tag{41.47}$$

来代替方程 (41.44) 中的准确的波函数是一个好的近似. 这个替代给出了能量移动的表式如下

$$\Delta\epsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}} = V^{-1}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}V_c\psi_c(\mathbf{x})d^3x + V^{-1}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}V_a\psi_c(\mathbf{x})d^3x. \tag{41.48}$$

此外，在现在的讨论中，我们将把吸引阱区域内的刚性核解用平面波来近似（Born 近似）

$$\psi_c \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (\text{在吸引势中，} b < r < b + b_W). \tag{41.49}$$

虽然相对波函数在刚性核内部为零(见图 41.4)，但它在 $r > b$ 处增长很快，而在势的力程以内就超过平面波值．由于积分中的权重因子是 r^2dr，Born 近似应当提供吸引能量的合理的估计．注意，只有对这里所用的非常简化的势，这种估计才是正确的．一个较为现实的模型，如果计及集中于刚性核外的强吸引作用，就需要比较细致的处理．例如，可以在不作进一步近似的情况下，算出方程 (41.48)，或者，刚性核加上附近的吸引作用，这个耦合问题在原则上可以严格地解出．(对于这个组合问题的一种比较容易掌握的处理可以在 Moszkowski 和 Scott 的文章中[1] 找到．)

借助于方程 (41.48) 和 (41.49)，相互作用对偶的能量移动，归结为纯刚性球气体能量移动在 Born 近似中用独立粒子模型所计算出来的吸引作用的贡献的和，

$$\Delta\varepsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}} = \Delta\varepsilon^c_{\mathbf{P},\mathbf{k}} + \Delta\varepsilon^a_{\mathbf{P},\mathbf{k}}. \quad (\text{独立粒子模型}) \tag{41.50}$$

后一个贡献曾在第 40 节中讨论过，在那里，对于粒子间的纯吸引势，我们计算了整个系集的能量移动[方程 (40.14)]和单粒子势 [方程 (40.19)]．最后这个量容易用适合于图 41.5 和方程 (41.39) 的参数算出

$$U^a(\mathbf{k}) = -\frac{V_0 k_F^3}{3\pi}\left[(d^3 - b^3) + \frac{9}{k_F}\int_0^d j_0(kz) j_1(k_F z) z\,dz\right], \tag{41.51}$$

因为 Serber 力要求 $a_W = a_M = \frac{1}{2}$，而积分是从刚性核力程

1) S. A. Moszkowski and B. L. Scott, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **11**: 65 (1960).

b 积到吸引势的外缘 $b + b_W = d$（见图41.5）. 显然 U^a 是各向同性的且仅取决于 k^2.

我们现在已准备好计算吸引作用对有效质量的贡献. 如前指出，不可能用单个有效质量在 k^2 的整个变程内给出单粒子谱的近似，因而必须在动量空间中选择适当的区域. 一种可能性是，认为最重要的虚跃迁发生在 Fermi 面附近，选择 m^* 以拟合单粒子谱在 k_F 处的数值和斜率(参看第 29 节). 如果在一般的值 k_0 附近把单粒子势近似为

$$U(k^2) \approx U(k_0^2) + \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_0^2)U_1 \qquad (41.52)$$

则相应的有效质量成为

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{1 + U_1}. \qquad (41.53)$$

为了重现 Fermi 面 $(k_0 = k_F)$ 附近的谱，U_1 必须选为

$$U_1 = \frac{m}{\hbar^2 k_F}\frac{dU}{dk}\bigg|_{k=k_F}. \qquad (41.54)$$

这个式子可以直接从方程 (41.51) 算出，我们求得[1)]

$$U_1 = \frac{3}{2\pi}\frac{V_0}{\hbar^2 k_F^2/2m}\left[\frac{\rho^3}{2}(j_1^2(\rho) - j_0(\rho)j_2(\rho))\right]_{k_F b}^{k_F d}, \qquad (41.55)$$

这里括号内的量应在指明的上下限之间进行计算. 对于方程

表 41.1　对于两种核密度，在 $k = k_F$ 和 $k = 0$ 处的有效质量

k_F	$U_1(k_F)^{1)}$	$(m^*/m)_{k=k_F}$	$U_1(0)^{2)}$	$(m^*/m)_{k=0}$
1.25 费米$^{-1}$	0.54	0.65	0.96	0.51
1.48 费米$^{-1}$	0.54	0.65	1.2	0.45

1) 见方程 (41.55). 2) 见方程 (41.56).

1) 所需的球 Bessel 函数的积分见于 L. I. Schiff 前引书，p. 86.

(41.39) 的简化势，其数值在表 41.1 中给出.

选择有效质量的另一方法是在 $k^2 = 0$ 附近把单粒子势展开；在方程 (41.51) 中以 $j_0(kz) \approx 1 - k^2z^2/6$ 代入，立即得到

$$U_1 = \frac{1}{2\pi} \frac{V_0}{\hbar^2 k_F^2/2m} [\rho^3 j^2(\rho)]_{k_F b}^{k_F d}. \qquad (41.56)$$

从这一表式算出的数值也列在表 41.1 中. 我们从表 41.1 注意到，有效质量对于平衡值附近的密度变化是相当不敏感的，而在 Fermi 海底部的有效质量比 Fermi 表面的有效质量稍小一点.

到此为止，在计算 m^* 时，我们完全忽略了刚性核. 为了证明这种省略是合理的，让我们回顾一下关于 Galitskii 方程的讨论，在那里，在 $c = k_F b$ 的第一级近似下，刚性核并不影响有效质量；由此得出，把有效质量看成是单纯由吸引阱和相互作用的交换本性引起的，是一个好的近似. 事实上，方程 (11.68) 表明：$c = 0.57$ 的刚性核对自旋为 1/2 的全同粒子系统的 Fermi 面上的有效质量的首要贡献是从

$$\Delta U_1^c \approx -\left(\frac{8c^2}{15\pi^2}\right) \times (7\ln 2 - 1) = -0.067$$

得到的，而同一个刚性核，如果出现在 p 态，则对 U_1 作如下贡献 (习题 4.6)

$$\Delta U_1^c \approx +\frac{c^3}{\pi} = +0.059.$$

这些贡献倾向于互相抵消，而改正项确实是很小的[1]. 以后，

1) 核物质有四个自旋自由度，因而在这些关系中分别添加因子 3 和 5/3. 对于从方程 (41.65) 导出的单粒子势 [方程 (41.45)] 的研究证实这个改正项对于核物质是很小的. 当这刚性核能量包括在 $U(\mathbf{k})$ 之中时，对 $k_F = 1.25$ 费米$^{-1}$ 所得到的 Fermi 面上的有效质量是 $m^*/m = 0.68$ (J. D. Walecka and L. C. Gomes, 前引文)，这一结果可以与表 41.1 中单单来自吸引阱的值 $m^*/m = 0.65$ 相比较.

在计算m^*时，我们将忽略刚性核．这在相当大程度上简化了我们现在的关于核物质的讨论，因为自洽条件不再是一个问题了．有效质量现在由方程(41.51)到(41.54)定出，这些方程是与m^*的值无关的．

现在有可能估计由方程(41.46)得出的核结合能．吸引阱的贡献$E^{(a)}$在方程(40.14)中给出；它可以像在方程(41.51)中一样地计算出来

$$\frac{E^{(a)}}{A}=-\frac{V_0k_F^3}{6\pi}\left[(d^3-b^3)+\frac{27}{k_F^2}\int_b^d j_1^2(k_Fz)dz\right]$$

$$=-\frac{V_0}{6\pi}\left[\rho^3+9\left\{\mathrm{Si}(2\rho)+\frac{\cos 2\rho-3}{2\rho}\right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{\sin 2\rho}{\rho^2}+\frac{1}{2\rho^3}(\cos 2\rho-1)\right\}\right]_{k_Fb}^{k_Fd} \qquad (41.57)$$

这里Si表示正弦积分函数 $\mathrm{Si}(x)=\int_0^x d\lambda \sin\lambda/\lambda$．此外，还存在一个无相互作用 Fermi 系集的原始能量$E^{(f)}$

$$\frac{E^{(f)}}{A}=\frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}. \qquad (41.58)$$

注意这一表式包含的是m而不是m^*，因为m^*只不过是一个处理单粒子$U(\mathbf{k})$的过份简化的方法，这种简化方法是在计算相互作用能量时所需要的．

对核结合能的最后一项贡献来自方程(41.50)中的刚性核．这个量可以由 Bethe-Goldstone 方程的解计算出来．由方程(41.2)可以得到刚性核问题中核子对偶的能量移动

$$\Delta\varepsilon_{\mathbf{P},\mathbf{k}}=V^{-1}\langle\mathbf{K}|V_c|\psi_{P,k}\rangle$$

$$=V^{-1}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}V_c\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x})d^3x. \qquad (41.59)$$

如第11节中所详细讨论过的，只有s波对总的刚性核相互作

用能量 $E^{(c)}$ 作出贡献，直到 c^2 的数量级．对于 s 波，由方程 (41.23) 我们得到

$$\frac{2m^*_{\mathrm{red}}}{\hbar^2 k_F^2} V_c u_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(r) = \mathscr{A}\delta(r-c) + w(r)$$

$$\approx \mathscr{A}\delta(r-c), \tag{41.60}$$

上式第二行的结果，是由于注意到 s 波泄漏只在 c^4 数量级对总能量作出贡献．总的归一化常数由方程 (41.36) 给出

$$\mathscr{A}(\mathbf{P},\mathbf{K}) = \left[\cos Kc - \int_0^\infty \cos Ks \chi \mathscr{P}(s,c)\,ds\right]^{-1}, \tag{41.61}$$

这里，我们现在考虑的是质心动量为 $\mathbf{P}$ 的相互作用核子对偶的一般情况(这里和本节以后的讨论中我们假定 $\mathbf{P}$ 是无量纲的，以 k_F 为单位来量度)．由方程 (41.5) 显然可见，方程 (41.8) 和 (41.22) 在 $\mathbf{P} \neq 0$ 时的推广是

$$\chi_P(r,r') = \frac{2rr'}{\pi}\int_{\bar{\Gamma}} j_0(tr) j_0(tr') \frac{d\Omega_t}{4\pi} t^2 dt, \tag{41.62}$$

这里 $\bar{\Gamma}$ 是图 41.1 所示的 Γ 的补余．方程 (41.62) 的角度积分给出

$$\int_{\bar{\Gamma}} \frac{d\Omega_t}{4\pi} = \begin{cases} 1 & \left(\text{对于 } t \leqslant \left[1-\left(\frac{P}{2}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}\right), \\ 1 - \dfrac{(P/2)^2 + t^2 - 1}{Pt} & \\ & \left(\text{对于} \left[1-\left(\frac{P}{2}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \leqslant t \leqslant 1 + \frac{P}{2}\right). \end{cases} \tag{41.63}$$

而方程 (41.61) 中的积分可以利用关系

$$\int_0^\infty \cos Ks \sin ts\,ds = \mathscr{P}\frac{t}{t^2 - K^2}$$

算出，这里 $\mathscr{P}$ 表示 Caucky 主值．这样，我们得到

$$\mathscr{A}(\mathbf{P},\mathbf{K}) = \left[\cos Kc - \frac{2c}{\pi}\mathscr{P}\int_{\bar{\Gamma}} \frac{j_0(tc)}{t^2 - K^2}\frac{d\Omega_t}{4\pi} t^2 dt\right]^{-1}. \tag{41.64}$$

方程(41.59)，(41.60)和(41.61)的结合给出

$$\Delta\sigma_{\mathbf{P},\mathbf{k}}^{(l=0)} \approx \frac{4\pi c}{k_F^3 V} j_0(Kc)\mathscr{A}(\mathbf{P},\mathbf{K}) \times \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_{\mathrm{red}}^*}(1-\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\rho_1\rho_2}). \tag{41.65}$$

因子 $1-\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\rho_1\rho_2}$ 是由于对自旋和同位旋全同的粒子的波函数进行反对称化而来的，这个因子就使这些粒子不能处在相对 s 态. 于是，刚性核相互作用能量由方程(41.46)给出如

$$E_{l=0}^{(c)} = \frac{1}{2}\sum_{k_1\lambda_1\rho_1}^{k_F}\sum_{k_2\lambda_2\rho_2}^{k_F}\Delta\sigma_{\mathbf{P},\mathbf{k}}^{(l=0)}. \tag{41.66}$$

把求和转换成积分并利用方程(41.65)和(39.15)，我们求得

$$\frac{E_{l=0}^{(c)}}{A} \approx \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}\frac{2c}{\pi}\iint_{(F)}\frac{d^3K_1}{(4\pi/3)}\frac{d^3K_2}{(4\pi/3)} j_0(Kc)\mathscr{A}(\mathbf{P},\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}\frac{2c}{\pi}\iint_{(F)}\frac{d^3K}{(4\pi/3)}\frac{d^3P}{(4\pi/3)} j_0(Kc)\mathscr{A}(\mathbf{P},\mathbf{K}), \tag{41.67}$$

这里 F 由两个 Fermi 球的相交部分定义[比较图41.1)]而 $\mathscr{A}(\mathbf{P},\mathbf{K})$ 由方程(41.64)和(41.63)定义. 用数值方法计算这一定积分所得之值，作为 $c=k_F b$ 的函数，示于图41.6. 如果方程(41.67)展开为 c 的幂级数，则前面的少数几个系数可以用解析方法算出. 方程(41.64)和(41.63)给出

$$\mathscr{A}(\mathbf{P},\mathbf{K}) = 1+\frac{c}{\pi}\left[1+\frac{P}{2}+K\ln\left(\frac{1+P/2-K}{1+P/2+K}\right) - \frac{K^2+(P/2)^2-1}{P}\ln\frac{(1+P/2)^2-K^2}{1-(P/2)^2-K^2}\right] + O(c^2), \tag{41.68}$$

而方程(41.67)成为

$$\frac{E^{(c)}}{A} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}[\alpha c+\beta c^2+O(c^3)], \tag{41.69}$$

这里

$$\alpha = \frac{2}{\pi}\iint_{(F)} \frac{d^3K}{(4\pi/3)}\frac{d^3P}{(4\pi/3)} = \frac{2}{\pi}, \tag{41.70 a}$$

$$\beta = \frac{2}{\pi^2}\iint_{(F)} \frac{d^3K}{(4\pi/3)}\frac{d^3P}{(4\pi/3)}\left[1 + \frac{P}{2} + K\ln\left(\frac{1+P/2-K}{1+P/2+K}\right) - \frac{K^2+(P/2)^2-1}{P}\ln\frac{(1+P/2)^2-K^2}{1-(P/2)^2-K^2}\right]$$

$$= \frac{12}{35\pi^2}(11 - 2\ln 2). \tag{41.70 b}$$

因而将方程 (41.67) 按 c 展开的幂级数为

$$\frac{E_{l=0}^{(c)}}{A} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}\left[\frac{2c}{\pi} + \frac{12c^2}{35\pi^2}(11 - 2\ln 2) + 0.26c^3 + \cdots\right]. \tag{41.71}$$

头两项就是关于相互作用刚性球 Fermi 气体以及 Galitsikii 方程的讨论中所得出的[参看方程(11.72)],这里的 Galitsikii 方程已作了推广以包括可能来自相互作用吸引部分的有效质量. 第三项(在这里没有计算)是由 DeDominicis 和 Martin 最先算出的[1],这正是他们的计算结果中关于独立对偶模型的 s 波相互作用的那一部分. 方程 (41.71) 的幂级数展开也描绘在图 41.6 中.

刚性核在 p 态对能量的贡献，可以从对 p 态的 Bethe-Golidstone 方程的完全类似的处理得到(见习题 11.7)

$$\frac{E_{l=1}^{(c)}}{A} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}\frac{c^3}{\pi}. \tag{41.72}$$

如第38节所注意到的,核力在 p 态相对地比较弱,但有某些证据表明,总的 p 态存在排斥作用.

---

1) C. DeDominicis and P. C. Martin, *Phys. Rev.*, 105 1417 (1957) 以及私人通信.

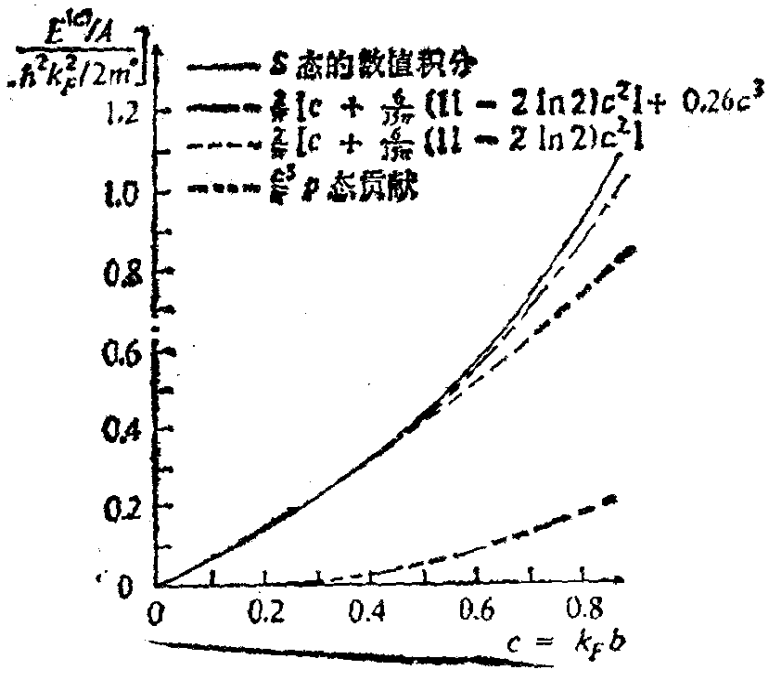


图 41.6　由方程 (41.67) 和幂级数近似[方程 (41.71)]计算出来的刚性核能量 $E_{l=0}^{(c)}/A$. 也绘出了由方程(41.72)算出的 p 波贡献 $E_{l=1}^{(c)}/A$.

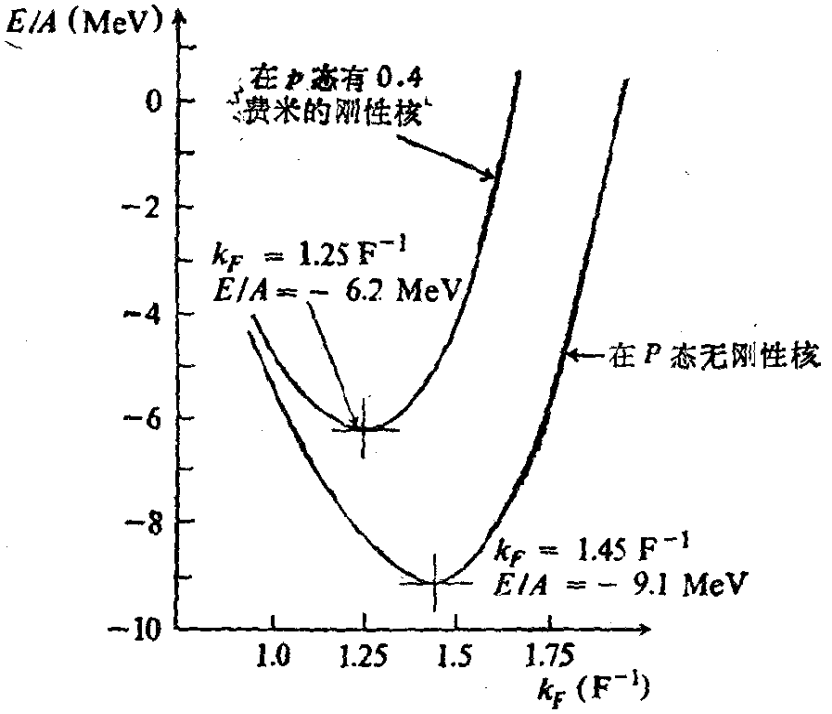


图 41.7　对于方程 (41.39) 到 (41.42) 的两体势，由方程 (41.57), (41.58), (41.67) 和 (41.72) 算出的核物质中每个粒子的能量作为 k_F 的函数. 结果分别按存在与不存在 p 态刚性核两种情况下算出.

由方程 (41.57)，(41.58) 和 (41.67) 所给出的核物质的能量，示于图 41.7. 所描绘的两条曲线，一条是具有方程 (41.72) 的来自 p 态刚性核的贡献的，另一条则没有这种贡献. 而 Fermi 面上的有效质量取自表 41.1，即

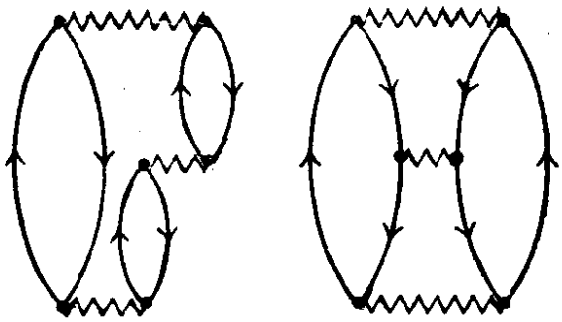
$$\frac{m^*}{m} = 0.65. \tag{41.73}$$

我们注意到这些结果的几个有意义的特点. 介质显然是饱和的，从能量的各种贡献来看，这是清楚的；因为在高密度下，刚性核的排斥作用总是主要的. 的确，对于密堆集的刚球，测不准原理要求，刚性核能量成为无限大[1]. 然而，由方程 (41.71) 显然可见，在远低于密堆集的密度，刚性核对能量的贡献成为重要的. 刚性核迫使 N 体波函数每当 $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| < b$ 时为零，从而使波函数有额外的曲率，增加了动能. 值得注意的是，核物质的这一非常简单的图象在接近正确的密度给出饱合. 算出来的结合能太小，这是可预料到的结果，因为我们假定单态与三重态力的差别只来自张量力，而张量力的效应在最低级近似下为零；而且还因为我们用了一个只对 $^1S_0$ 散射拟合的吸引阱. 然而，张量力仍然对能量作出第二级的贡献；而且，像所有第二级效应一样，这些贡献总是使结合增强[2].

结合能是一个大的吸引能和一个大的排斥能的差，因此，它对所取的近似非常敏感. 为了表明这一点，下面列出在 $k_F = 1.50$ 费米$^{-1}$时的能量的各种贡献，

$$E^{(a)}A^{-1} = -76.9 \text{ 兆电子伏},$$
$$E^{(f)}A^{-1} = +28.0 \text{ 兆电子伏},$$
$$E^{(c)}_{l=0}A^{-1} = +39.9 \text{ 兆电子伏},$$
$$E^{(c)}_{l=1}A^{-1} = +4.9 \text{ 兆电子伏}.$$

1) 关于这一点的讨论参见 R. K. Cole, Jr., *Phys. Rev.*, **155**: 114 (1967).
2) 注意，m^*/m 的值更接近于 1，也会使结合增强.



(a)　　(b)

图 41.8　核物质的一些典型高级 Goldstone 图解：
(a) 三体集团　　(b) 空穴-空穴散射.

核力有两个特性倾向于使核物质的密度保持很低，这两个特性是：刚性核和 Serber 相互作用，Serber 相互作用使吸引力减小，并从而也使图 41.7 中的极小值向低密度方向移动. 所得到的粒子间距有足够的空间，使波函数的"创伤"得以治愈. 这一结果解释了原子核的独立粒子模型能成功的原因，并且证明，用独立对偶处理核物质是正确的.

可以认为，本节的讨论是 Brueckner[1]，Bethe[2]，和其他人所发展的核物质理论的一种过份简化的说法. 就是说，我们这里只保留了最重要的物理特点，并且作了许多近似；而在任何关于核物质的较为现实的讨论中，这些近似都必须加以改进. 例如，这种形式的独立对偶模型略去了许多高级贡献，如三体集团（定义为包含三根空穴线的 Goldstone 图解），或者空穴-空穴散射的贡献，它们涉及三个或更多的粒子，如在关于 Galitsikii 方程的讨论中所看到的那样[3]. 图 41.8 给出了一些典型的高级 Goldstone 图解. 所有这些过程都涉及到两个以上粒子的同时碰撞，而且恢复长度短，就保证这样的过程的

1) K. A. Brueckner, 前引文.
2) H. A. Bethe, 前引文.
3) 关于这里的计算与 Σ^* 的图解分析和基态能量移动的精确关系将在第 42 节中讨论.

发生的概率很小. Bethe 和他的同事们曾对这些多粒子集团的贡献作了很详尽的分析，他们用 Fadeev 方程正确地计算了三体集团的贡献[1]. 这些高级集团的贡献的净效果是，把核物质的结合能减少了大约 1 兆电子伏.

除了要包括高级集团，还必须对两粒子贡献的计算加以改进. 为了举例说明，也为了简单，我们采用了有效质量近似；不幸的是，正确的答案对于所选择的 m^* 的精确值很敏感. 有效质量近似并不是很好的近似，也是事实. 一条较好的途径是 Bethe, Brandow 和 Petschek 的*参考谱方法*[2]，这方法选择单粒子势使高级项的贡献取极小值. 结果是粒子与空穴要区别对待，给空穴指定这里所讨论的自洽单粒子势，而给粒子则指定自由谱. 在这种方法中，单粒子势只不过是一个计算工具. 它对应于可以自由地重写哈密顿函数，

$$H = T + \sum_i U(i) + \left[\sum_{i<j} V(ij) - \sum_i U(i)\right], \quad (41.74)$$

然后选择单粒子势 $U(i)$ 使能量的展开式的收敛性达到极大.

在核物质的研究中，还有一个问题，就是缺少关于奇角动量态的核子-核子力的知识. 像从图 41.7 所能看到的那样，这个影响是大的，不同的势将给出不同的结合能的值. 另一个问题是真实多体力的影响，它可能出现在原来的哈密顿函数中，因为核子间的介子交换过程会因其他核子的存在而有变动. 对这问题的任何分析都是很困难的，流行的想法是利用拟合于核子-核子散射的两体势来计算尽可能最佳的结合能和密度. 只有当仍然不符合时，我们才被迫引进多体力. 但目前的情况是，单单由两体力得出的理论值和观察值

---

1) 参阅 R. Rajaraman and H. A. Bethe, *Rev. Mod. Phys.*, **39**: 745 (1967).

2) H. A. Bethe, B. H. Brandow, and A. G. Petschek, *Phys Rev.*, **129**: 225 (1963).

(结合能为−16兆电子伏以及密度为 $k_F = 1.4$ 费米$^{-1}$)是接近的[1].

42. 与 Green 函数和 Bethe-Salpeter 方程的关系

在前面几节中，我们用 Bethe-Goldstone 方程对核物质进行了讨论，现在我们把这一讨论与 Galitskii 方程和 Green 函数联系起来. 为简单起见，先完全略去 Bethe-Goldstone 方程中的自洽性，并假定各能量分母只包含自由粒子的动能. 这样，Bethe-Goldstone 方程就化为第 36 节所研究的那种较为简单的形式，它与第 11 节的 Galitskii 方程更密切类似. 回想一下，在 Galitskii 方法中，我们是把梯形图作为 Feynman 图解来求和，从而计算出 Green 函数的. 首先，我们注意到，如果我们只关心基态能量移动的计算，那么 Galitskii 方程可以相当简化. Green 函数与基态能量移动的关系由方程 (9.38) 给出，

$$E - E_0 = \frac{-iV\hbar}{2(2\pi)^4}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int d^4p \mathrm{tr}[\Sigma^{\star\lambda}(p)G^{\lambda}(p)]e^{ip_0\eta}. \quad (42.1)$$

这里，耦合常数的积分还未完成. 为了和梯形近似下 $\Sigma^\star$ 的方程 (11.28) 中出现 G^0 相一致，我们在方程 (42.1) 中用 $G^0(p)$ 代替 $G(p)$，这样，我们把所有的梯形复杂性和对 λ 的依赖关系都放到 $\Sigma^\star(p)$ 中去了[2]. 于是 Galitskii 方法中关于基态能量移动的起始表示式为

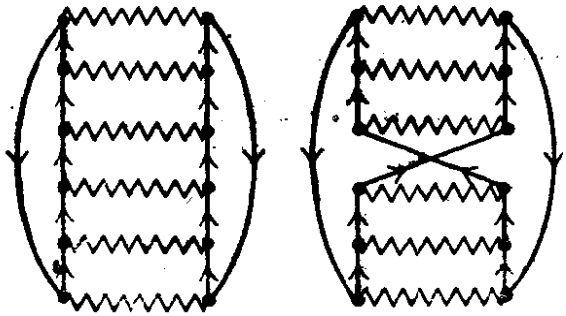
$$E - E_0 = \frac{-iV\hbar}{2(2\pi)^4}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} d^4p \mathrm{tr}[G^0(p)\Sigma^{\star\lambda}(p)]e^{ip_0\eta}. \quad (42.2)$$

---

1) 对核物质计算的评述，参阅 B. Day, *Rev. Mod. Phys.*, **39**: 719 (1967); R. Rajaraman and H. A. Bethe, 前引文.

2) 这一近似的第一改正包括 $\int d^4p[\Sigma^\star(p)G^0(p)]^2$，当 $\Sigma^\star$ 与频率无关时，它等于 0. 这对于非奇异势 [方程 (10.21)] 和对于刚球气体 [方程 (11.57)] 在首要各项都是正确的.

这一表示式，使我们可以就基态能量移动画出一组 Feynman 图解. 梯形近似中的一般项绘于图 42.1. 注意，这些都是 Feynman 图解；因而，只有图的拓扑结构是重要的，我们可以把任意一对线画成返回线，而在交换图解中可把任意一对线画成交叉线.由于 Feynman-Green 函数既包括粒子的传播也包括空穴的传播，因而这些图解中各种不同的相对时间顺序，可以用来描述任一瞬间存在许多粒子和空穴的很复杂的过程. 然而方程 (11.35) 已经表明，梯形图中任意一对粒子，在每两次相互作用之间传播时，或者是两个粒子都在 Fermi 海以上，或者是两个粒子都在 Fermi 海以下. 在计算能量移动时，每一对空穴线将导致一对额外的因子 $\int^{k_F} d^3k' \int^{k_F} d^3k''$. 因而在低密度下，按照所保留的空穴线的数目来对贡献进行分类是有意义的[1] (参看第 11 节末的讨论). 显然，空穴数量至少是 2；这样，*在低密度极限下，我们只需保持一个中间对偶作为空穴传播，所有其它的对偶则可以利用 Green 函数的粒子部分*. 在第 n 级近似中，有 n 个可能的方式来选择那个作为空穴起作用的对偶. 而图的对称性表明，这 n 项全都是恒等的. 现在我们可以进行第 n 级贡献中的耦合常数积分，



(a) (b)

图 42.1 对 $E - E_0$ 的第六级梯形贡献.

1) 这一意见最早是由 N. M. Hugenholtz 提出的，*Physica*, **23**: 533 (1957).

$$\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} n\lambda^n = 1.$$

因此，$n-1$ 个对偶作为粒子传播而一个对偶作为空穴传播，这种图解可以只保留一个.假定在Γ[见方程(11.30)]中所有的中间对偶都作为粒子传播，而空穴对偶则来自 Σ^* 和 $E-E_0$ 中的两个附加因子 G^0，这是最为方便的.

这样，在低密度近似下，基态能量移动的 Galitskii 方程可以如下改写. 基态能量可由下式得到

$$E - E_0 = -\frac{1}{2} iV\hbar(2\pi)^{-4}\int d^4p \times \mathrm{tr}[G^0(p)2^*(p)]e^{ip_0\eta}, \qquad (42.3)$$

这里耦合常数的积分已经完成. 相应的自能由方程(11.49)给出

$$\hbar\Sigma^*(p) = -j(2\pi)^4 \int d^4k G^0(k) \times [4\Gamma(pK;pK) - \Gamma(kp,pK)]e^{ik_0\eta}. \qquad (42.4)$$

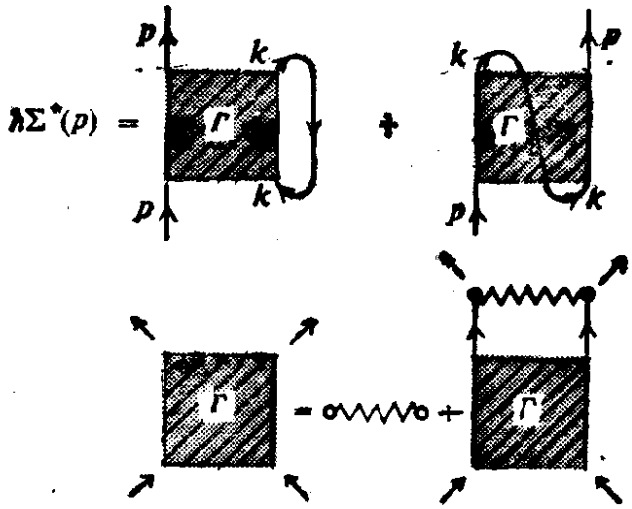


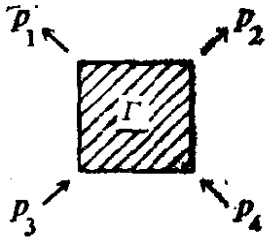
图 42.2 Galitskii 方法中的 Σ^*的结构.

(见图 42.2)，这里我们利用了核物质的与自旋以及同位旋有关的四重简并性. 介质中的散射振幅是修订的 Galitskii 波函

数 χ_m 与势的卷积[见方程 (11.40)]

$$\Gamma(\mathbf{q}\mathbf{q}';P) = \hbar^2 m^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3t v(\mathbf{t})\chi_m(\mathbf{q}-\mathbf{t};\mathbf{q}',P), \quad (42.5)$$

这里散射问题中的变量示于图 42.3，而 χ_m 本身又是下列积分方程的解[参见方程 (11.39)]



$$\mathbf{q} = \tfrac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) = \tfrac{1}{2}(\mathbf{p} - \mathbf{k})$$
$$\mathbf{q}' = \tfrac{1}{2}(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) = \tfrac{1}{2}(\mathbf{p} - \mathbf{k})$$
$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p} + \mathbf{k}$$

图 42.3　图 42.2 中关于 Γ 的动量变量.

$$\chi_m(\mathbf{q},\mathbf{q}';P) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}') + \frac{\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}+\mathbf{q}\right|-k_F\right)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P}-\mathbf{q}\right|-k_F\right)}{mE/\hbar^2 - \mathbf{q}^2 + i\eta} \times \int \frac{d^3t}{(2\pi)^3} v(\mathbf{t})\chi_m(\mathbf{q}-\mathbf{t},\mathbf{q}';P). \quad (42.6)$$

按照前面的讨论，修订的 Galitskii 波函数所满足的积分方程只含有 Galitskii 积分核的粒子-粒子部分.分母中出现的能量是在动量中心系的总能量，它由方程 (11.36) 定义

$$E = \hbar P_0 - \frac{\hbar^2\mathbf{P}^2}{4m} = \hbar k_0 + \hbar p_0 - \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} - \frac{\hbar^2\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar^2\mathbf{q}'^2}{m}. \quad (42.7)$$

我们将根据第 41 节的讨论写出相应的方程. 如果用 Fourier 变换改写 $m^* = m$ 时的 Bethe-Goldstone 方程 (41.1) 和 (41.2)，则对偶的能量移动成为

$$\Delta\varepsilon(\mathbf{q}', \mathbf{q}'; \mathbf{P}) = \hbar^2(mV)^{-1}\int e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{x}}v(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{P},\mathbf{q}'}(\mathbf{x})d^3x$$

$$= \hbar^2(mV)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3t v(\mathbf{t})\psi$$

$$\times(\mathbf{q}' - \mathbf{t}, \mathbf{q}'; \mathbf{P}), \qquad (42.8)$$

这里我们用了与方程 (42.5) 相似的记号，而动量空间的波函数满足如下方程

$$\psi(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathbf{P}) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$$

$$+ \frac{\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P} + \mathbf{q}\right| - k_F\right)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\mathbf{P} - \mathbf{q}\right| - k_F\right)}{q'^2 - q^2 + i\eta}$$

$$\times\int\frac{d^3t}{(2\pi)^3}v(\mathbf{t})\psi(\mathbf{q} - \mathbf{t}, \mathbf{q}'; \mathbf{P}). \qquad (42.9)$$

这是一个把 Fermi 球排除在虚态以外的自由散射波动方程 [参见方程 (11.11)]. 单粒子能谱作为各个对偶的相互作用能量之和，在方程 (41.45) 中给出

$$U(\mathbf{p}) = V(2\pi)^{-3}\int^{k_F} d^3k[4\Delta\varepsilon(\mathbf{q}', \mathbf{q}'; \mathbf{P})$$

$$- \Delta\varepsilon(-\mathbf{q}', \mathbf{q}'; \mathbf{P})], \qquad (42.10)$$

这里的变量也如图42.3中那样规定. 方括号内的第二项显示交换贡献，交换贡献起源于用反对称波函数表示自旋和同位旋都相同的态的对偶. 最后得到，系集的相互作用能为 Fermi 海中所有粒子相互作用能量 $U(P)$ 的和的一半 [比较方程 (41.45) 和 (41.46)].

$$E - E_0 = \frac{1}{2}4V(2\pi)^{-3}\int^{k_F} d^3pU(\mathbf{p}). \qquad (42.11)$$

为简单起见，我们假定力是与自旋和同位旋无关的.

现在有可能证明 Bethe-Goldstone 方程 (42.8) 到 (42.11)，和Galitskii 方程 (42.3) 到 (42.6)，是等同的. 证明如下. 方

程 (42.6) 中修订的 Galitskii 波函数 χ_m 在上半 k_0 平面是解析函数. (注意，χ 本身并不如此). 由于方程 (42.5) 中 Γ 就是 χ_m 与势的卷积，所以 Γ 也是在上半 k_0 平面解析的函数. 其结果是，当正规自能 [方程 (42.4)] 在上半 k_0 平面按闭合路线积分时，唯一的贡献是来自 $G^0(k)$ 的极点 $k_0 = \omega^0_{\mathbf{k}} = \hbar\mathbf{k}^2/2m$. 我们现在看到 $\Sigma^*(p)$ 在上半 p_0 平面也是 p_0 的解析函数；当方程 (42.3) 中的积分迴路也在上半平面闭合时，唯一的贡献又是来自 $G^0(p)$ 的极点 $p_0 = \omega^0_{\mathbf{p}} = \hbar\mathbf{p}^2/2m$. 能量移动的表示式因而成为

$$E - E_0 = \frac{1}{2} 4V(2\pi)^{-3} \int^{k_F} d^3p \hbar\Sigma^*(\mathbf{P}, \omega^0_{\mathbf{p}}), \quad (42.12)$$

精确地重现了 Bethe-Goldstone 的结果. 从前面的讨论显然可见，基态能量的 Bethe-Goldstone 表示式，是由梯形贡献求和得到的，这些梯形被解释为 Goldstone 图解 (见习题 11.11)，其中的中间对偶总是作为粒子传播的.

总之，我们已经证明，由 Galitskii 方程和由 Bethe-Goldstone 方程得出的基态能量在低密度下是一致的. 但是重要的是要注意，对于其它物理量，这种对应并不一定成立. 特别是，由于计及空穴-空穴散射[1]，正规自能与单粒子 $U(\mathbf{k})$ 有所差异. 因为，给出正确的单粒子能量的是 $\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, k_0)$，我们又一次地看到，$U(\mathbf{k})$ 只不过是计算基态能量的一个方便的工具.

上面所描述的 Bethe-Goldstone 理论原则上仍然和 Brueckner 理论不同，因为 Brueckner 理论依赖于一个自洽的单粒子势. 用 Green 函数的术语来说，这个结果是把 $G^0(p)$ 换成 $G(p)$ 而得到的，这个 $G(p)$ 包括了与 Γ 有关的自能效

---

1) N. M. Hugenholtz and L. Van Hove, *Physica*, **24**: 363 (1958) 以及D. J. Thouless, *Phys. Rev.*, **112**: 906 (1958) 首先着重指出了这一点.

应．此外，Γ 本身是由 G 决定的，而不是由 G^0 决定的．我们把这个自洽理论的方程图解示于图 42.4 中．这些方程按现

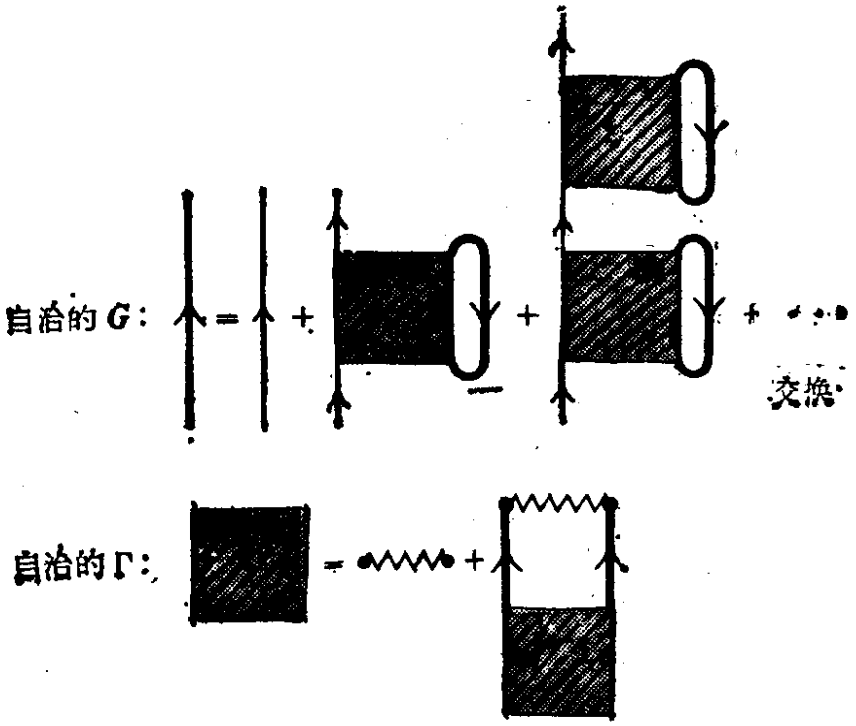


图 42.4　G 和 Γ 的自洽理论

在的形式是十分难以对付，因为 $\Sigma^*(\mathbf{p}, p_0)$ 对频率的依赖关系使得 Γ 的积分方程大为复杂化（这一困难有时叫作离开能量壳层的传播）．在一系列近似下，可以从这些方程得出比较简单的 Brueckner-Goldstone 理论．第一个近似，自洽性只是按平均来处理，我们采用一个与频率无关的自能 $\Sigma^*_{sc}(\mathbf{p}) \equiv \Sigma^*(\mathbf{p}, \varepsilon_p/\hbar)$，这个自能是置 $p_0 = \varepsilon_{\mathbf{p}}/\hbar$ 而得到的，这里 $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ 满足如下的自洽方程

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \varepsilon^0_{\mathbf{p}} + \hbar\Sigma^*(\mathbf{p}, \varepsilon_{\mathbf{p}}/\hbar) \equiv \varepsilon^0_{\mathbf{p}} + \hbar\Sigma^*_{sc}(\mathbf{p}). \quad (42.13)$$

这样，Green 函数近似地由下式给出

$$G_{sc}(\mathbf{p}, p_0) = \frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F)}{p_0 - \varepsilon_{\mathbf{p}}/\hbar + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|)}{p_0 - \varepsilon_{\mathbf{p}}/\hbar - i\eta}. \quad (42.14)$$

其次，这一 Green 函数既被用来计算正规自能[方程(42.41)]，也被用来计算散射振幅[方程(42.5)和(42.6)]．我们又一次

地省略空穴-空穴散射而得到 χ_m，这种散射在低密度极限下可认为是很小的. 对于自洽波函数的唯一影响是，把方程(42.6)的分母由

$$mP_0/\hbar - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\mathbf{p}+\mathbf{q}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}|\mathbf{p}-\mathbf{q}|\right)^2 + i\eta$$

变成 $(m\hbar^2)(\hbar p_0 - \epsilon_{\frac{1}{2}\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\frac{1}{2}\mathbf{p}-\mathbf{q}}) + i\eta$. 这一组方程决定近似的自洽谱 ϵ_p. 第三，基态能量是用 $G_{sc}(\mathbf{p}, p_0)$ 和 $\Sigma^{\star}_{sc}(\mathbf{p})$ 由方程(9.36)算出，

$$\begin{aligned} E &= -4iV(2\pi)^{-4}\int d^4p e^{ip_0\eta}\left[\epsilon^0_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\hbar\Sigma^{\star}_{sc}(\mathbf{p})\right]G_{sc}(p) \\ &= 4V(2\pi)^{-3}\int d^3p\left[\epsilon^0_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\hbar\Sigma^{\star}_{sc}(\mathbf{p})\right]\theta(k_F - |\mathbf{p}|) \\ &= E_0 + 2V(2\pi)^{-3}\int d^3p\hbar\Sigma^{\star}_{sc}(\mathbf{p})\theta(k_F - |\mathbf{p}|). \end{aligned} \tag{42.15}$$

这个结果等同于把 $G_{sc}(\mathbf{p}, p_0)$ 与 $\Sigma^{\star}_{sc}(\mathbf{p})$ 代入方程(42.3)所得的结果. 然而，我们注意到，由于 $\Sigma^{\star}_{sc}(\mathbf{p})$ 和 $\epsilon_{\mathbf{p}}$ 对 λ 的复杂依赖关系，这个结果不能从方程(42.1)的原来形式直接得出.

43. 核物质中的能隙

作为本章的最后一个课题，我们研究核物质中的能隙. 半经验的质量公式表明，最后一对相同粒子（pp 或 nn）对核的结合能贡献一个附加量

$$E_{\text{pair}} = 34\,A^{-\frac{3}{4}}\text{兆电子伏}. \tag{43.1}$$

此外，Bohr，Mottelson 和 Pines[1] 注意到，偶偶核的能谱显示有大约 1 兆电子伏的能隙（第十五章还要回到这个问题上）.

---

1) A. Bohr, B. R. Mottelson, and D. Pines, *Phys, Rev.*, **110**: 936.(1958).

这样，存在一些经验的证据表明，相同的核子倾向于配对，而寻找核物质中的能隙方程的非寻常（超导）解，是十分有意义的.

能隙由方程(37.35)定出

$$\Delta_k = \frac{1}{2}\sum_{k'}\langle \mathbf{k}-\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'-\mathbf{k}'\rangle \frac{\Delta_{k'}}{(\Delta_{k'}^2+\xi_{k'}^2)^{1/2}}, \quad (43.2)$$

这里我们采用第十章的约定：对于吸引势，$V>0$. 我们把配对限于相同的粒子，即 $(p\uparrow p\downarrow)$ 或 $(n\uparrow n\downarrow)$，而且假定，V 与自旋及同位旋无关[1]. 为了得到这个非线性积分方程的显式解，作下列近似是方便的：

1. 从化学势 μ 算起的单粒子激发能量 ξ_k 用有效质量近似写为

$$\begin{aligned}\xi_k &= \varepsilon_k^0 - \sum_{k'}\langle \mathbf{k}\mathbf{k}'|\bar{V}|\mathbf{k}\mathbf{k}'\rangle v_{k'}^2 - \mu \\ &\approx \varepsilon_k^0 + U(k) - [\varepsilon_{k_F}^0 + U(k_F)] \\ &\approx \hbar^2(2m^*)^{-1}(k^2-k_F^2). \end{aligned} \quad (43.3)$$

2. 由于所得的能隙 Δ 远小于 ε_F，方程(43.2)的被积函数在 $\xi=0$ 附近有一个尖锐的峰值，因而可以令

$$\Delta_k \approx \Delta_{k_F} \equiv \Delta \quad (43.4)$$

在这种情况下，能隙方程成为

$$1 = \frac{1}{2}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int\frac{e^{-i\mathbf{k}_F\cdot\mathbf{x}}V(x)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}d^3x}{\{\Delta^2+[\hbar^2(k^2-k_F^2)/2m^*]^2\}^{1/2}}, \quad (43.5)$$

这里 $\mathbf{k}_F$ 是 Fermi 面上的任意波矢量. 对 $d\Omega_k$ 和 $d\Omega_x$ 的角度积分现在可以算出，从而给出

---

1) 第十五章将要详加讨论，配对来自最后的那些价粒子. 除了最轻的那些核外，在所有的核中，对中子和质子来说，最后填满的态是很不同的. 因而价中子和价质子间的相互作用矩阵元的重叠，一般说来要小于处在同样的态中的相同粒子. 这就是我们只考虑相同核子的配对的理由.

$$1 = \frac{2m^*}{\pi\hbar^2 k_F^2}\int_0^\infty k_F dx \sin(k_F x) V(x)$$

$$\times \int_0^\infty K dK \frac{\sin[K(k_F x)]}{[\bar{\Delta}^2 + (K^2-1)^2]^{1/2}}, \qquad (43.6)$$

这里我们引进了如下的无量纲变数

$$\bar{\Delta} \equiv \frac{\Delta}{\hbar^2 k_F^2/2m^*} \equiv \frac{\Delta}{\varepsilon_F^*}, \qquad K = \frac{k}{k_F}. \qquad (43.7)$$

我们关心的是，当 $\bar{\Delta} \to 0$ 时这一表示式的极限，这时方程 (43.6) 中的第二个积分可以算出如下

$$\int_0^\infty K dK \frac{\sin[K(k_F x)]}{[\bar{\Delta}^2 + (K^2-1)^2]^{1/2}}$$

$$\underset{\bar{\Delta}\to 0}{=} \left[\ln\left(\frac{8}{\bar{\Delta}}\right) - \int_0^{2k_F x} \frac{d\lambda}{\lambda}(1-\cos\lambda)\right]\sin k_F x$$

$$+ \left(\int_{2k_F x}^\infty \frac{d\lambda}{\lambda}\sin\lambda\right)\cos k_F x. \qquad (43.8)$$

势 $V(x)$ 的力程有限，保证了量 $k_F x$ 是有界的；因而方程 (43.8) 主要是第一项，我们写出

$$\int_0^\infty K dK \sin[K(k_F x)] \frac{1}{[\bar{\Delta}^2 + (K^2-1)^2]^{1/2}}$$

$$\underset{\bar{\Delta}\to 0}{\approx} \sin k_F x \ln\frac{8}{\bar{\Delta}}. \qquad (43.9)$$

对于任何很小的有限的 $\bar{\Delta}$，这一近似的正确性可用方程 (43.8) 加以验证(见习题 11.12).

我们现在可以完成方程 (43.5) 的求解. 用定义

$$k_F \int_0^\infty \sin k_F x V(x) \sin k_F x dx \equiv \langle k_F | V | \varphi_{k_F}\rangle, \qquad (43.10)$$

方程 (43.6) 和 (43.9) 成为

$$\frac{1}{\langle k_F | V | \varphi_{k_F}\rangle} \underset{\bar{\Delta}\to 0}{\approx} \frac{2m^*}{\pi\hbar^2 k_F^2}\ln\frac{8}{\bar{\Delta}} \qquad (43.11)$$

将上式写成指数式，给出

$$\bar{\Delta} \approx 8\exp\left(-\frac{\pi\hbar^2k_F^2/2m^*}{\langle k_F|V|\varphi_{k_F}\rangle}\right), \tag{43.12}$$

核物质中的能隙用通常的单位给出为

$$\Delta \approx 8\,\frac{\hbar^2k_F^2}{2m^*}\exp\left(-\frac{\pi\hbar^2k_F^2/2m^*}{\langle k_F|V|\varphi_{k_F}\rangle}\right). \tag{43.13}$$

利用拟合于 $^1S_0$ 散射的非奇异方阱势(图 41.2)，可以得出这个量的粗略估计值，

$$\begin{aligned}\langle k_F|V|\varphi_{k_F}\rangle &= V_0\int_0^{k_Fd}\sin^2x\,dx\\ &= V_0\left(\frac{1}{2}k_Fd-\frac{1}{4}\sin 2k_Fd\right).\end{aligned} \tag{43.14}$$

从关于核物质的讨论，我们取得 $m^*/m = 0.65$，并将求得的能隙列于表 43.1. 由于 $\epsilon_F^* = (m/m^*)\epsilon_F \approx 65$ 兆电子伏，方程 (43.7) 中所定义的量 $\bar{\Delta}$ 确实是很小的.

在核物质的平衡密度下 ($k_F \approx 1.42$ 费米$^{-1}$) 所得的能隙是很小的，这就证明了以前对大块性质的处理是正确的. 特别是，所计算出的 Δ 值远小于偶偶核能谱中所观测到的能隙，也远小于经验质量公式中的配对能 (对于最重的那些已知核而言). 然而，必须注意的是，能隙是按核物质计算出来的，而有限核的实际的配对能却是来源于密度低得多的表面区域中的核子. 表 43.1 表明能隙非常强烈地依赖于密度，并且在 $k_F = 1.0$ 费米$^{-1}$ 时变得大到 2.5 兆电子伏. 当然，这个估计是很粗糙的. Emery 和 Sessler[1] 曾经用 Bethe-Goldstone 方程得出了 $\langle k_F|V|\varphi_{k_F}\rangle$ 的远为实际的值. 尽管如此，他们得出的 Δ 的值和表 43.1 中的值是很相似的.

---

1) V. J. Emery and A. M. Sessler, *Phys. Rev.*, **119**: 248 (1960).

表 43.1　两种核密度的核物质中的能隙

k_F（费米$^{-1}$）	△（兆电子伏）
1.42	9.3×10^{-2}
1.00	2.5

习　　题

11.1　(a) 设一力程为 d 的方阱势，有一个零能量的束缚态. 试利用有效力程展开式 $k\cot\delta_0 = -1/a + \frac{1}{2} r_0 k^2$ 证明 $r_0 = d$.

(b) 设图 41.5 所示的刚性核方阱势有一个零能量的束缚态，试证明 $r_0 = 2b + b_W$.

11.2 (a) 假设核相互作用等价于一个缓慢变化的势 $-U(r)$. 在任何小体积元内，假设粒子构成一种无相互作用 Fermi 气体，能级填满到能量 $-B$. 在平衡时，B 必须在整个原子核内是一样的. 从这些描述出发，导出核密度的 Thomas-Fermi 表示式

$$n(r) = (2/3\pi^2)(2m/\hbar^2)^{3/2}[U(r) - B]^{\frac{3}{2}}.$$

(b) 利用流体静力学的力 $-\nabla P$ 和势引起的力 $n\nabla U$ 两者的平衡导出 (a) 的结果.

11.3　对称能 E_4/A [方程 (39.8) 和 (39.12)] 可以如下估计. 假设方程 (40.10) 的非奇异势，计算 $A = Z + N$ 个核子而 $\delta \equiv (N - Z)/A \fallingdotseq 0$ 的 Fermi 气体模型中 $\hat{H}$ 的期待值.

(a) 利用方程 (40.9) 证明

$$\frac{E_4}{A} = \frac{\delta^2}{3}\left\{\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} - \frac{k_F^3}{\pi}\int_0^\infty V(z)[a_M + a_W j_0^2(k_F z)]z^2 dz, (\delta \to 0),\right.$$

这里，在 k_F 的有效质量由

$$\frac{\hbar^2 k_F}{m^*} = \{d[\varepsilon_k^0 + U(k)]/dk\}_{k=k_F}$$

给出，而 $U(\mathbf{k})$ 由方程(40.17)到(40.19)定义. 试讨论这一结果的物理意义，并与习题 1.6 和 1.7 相比较.

(b) 用 $m^* \approx 0.65$(表 41.1)和图 41.2 的势证明 $a_4 \approx 37$ 兆电子伏.

11.4 证明，在最低级近似下，Serber 交换型两体张量力

$$V = V_T S_{12} \frac{1}{2}(1 + P_M)$$

对自旋和同位旋都是 1/2 的 Fermi 气体(即核物质)的能量没有贡献.

11.5 已给一个高度为 V_0 而力程为 b 的排斥方阱势，如果 $l = 0$ 的波函数为 u/r，求证当 $V_0 \to \infty$ 时，

$$Vu \to A\delta(r - b),$$

这里 A 是一个可以与能量有关的常数.

11.6 对任意的 $\mathbf{P}$，试将 Bethe-Goldstone 方程 (41.5) 和 (41.2) 进行严格的分波分解. 证明偶 l 波是耦合的，就像奇 l 波一样. 估计这种耦合得以影响刚球 Fermi 气体的基态能量的 ($c = k_F a$ 的)最低级数.

11.7 利用纯刚性核 p 波势的 Bethe-Goldstone 方程证明

$$E_{l=1}^{(c)}/A = (\hbar^2 k_F^2/2m)(c^3/\pi),$$

并与习题 4.76 比较.

11.8 核物质的压缩率可以定义为

$$K_v^{-1} \equiv k_F^2[d^2(E/A)/dk_F^2]_{\text{平衡}}.$$

(a) 由图 41.7，对于所示两种情形，近似地计算 K_v. 并把 K_v 与通常的热力学压缩率联系起来.

(b) 试与同样密度下的无相互作用的 Fermi 气体的相应

值进行比较.

11.9 Λ 粒子是奇异数为 -1 的重子，因而可以与核子区别开来. 试证明，在硬球核气体中引进硬球 Λ 粒子而引起的能量移动由下式给出:

$$E_c = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2\mu}\left\{\frac{8k_F a}{3\pi} + \frac{8(k_F a)^2}{\pi^2}\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2(1-\eta)}\right.\right.$$
$$\left.\times\left(\frac{3-\eta^2}{6\eta} - \frac{1}{3} - \frac{(\eta^2-1)^2}{4\eta^2}\ln\frac{1+\eta}{1-\eta}\right)\right]$$
$$\left.+ O(k_F a)^3\right\},$$

这里 a 为 Λ-核子刚性核的力程 (比较图 11.1)，$1/\mu = 1/m_N + 1/m_\Lambda$，而 $\eta = (m_\Lambda - m_N)/(m_\Lambda + m_N)$.

11.10 考虑 Λ 粒子在原子核中的结合能.

(a) 如果把原子核看作一个深度为 U_0 而力程为 $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ 的方阱势，证明 Λ 粒子的结合能 B_Λ 由下列方程的解给出，

$$s = (1-x)^{-\frac{1}{2}}\cot^{-1}\left[-\left(\frac{x}{1-x}\right)^{\frac{1}{2}}\right],$$

$$B_\Lambda = U_0 - \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu_\Lambda R^2}\left(1 - \frac{2}{s} + \frac{3}{s^2} + \cdots\right) \qquad (s \to \infty),$$

这里 $s = [(2\mu_\Lambda R^2/\hbar^2)U_0]^{\frac{1}{2}}$，$x \equiv B_\Lambda/U_0$ 而

$$\frac{1}{\mu_\Lambda} = \frac{1}{m_\Lambda} + \frac{1}{Am_N}.$$

说明如何利用这些结果来验明 Λ 粒子在核物质中的结合能.

(b) 设 Λ-核子势的形式如图 41.5 所示. 试在独立对偶近似的框架内，讨论 Λ 粒子在核物质中的结合能的计算[1].

11.11 从 Goldstone 定理出发，证明 Bethe-Goldstone 方程

---

1) 关于这一问题的评述参阅 A. R. Bodmer and D. M. Rote, "Proceedings of the International Conference on Hypernuclear Physics," Vol II. p.251. Argonne National Laboratory, Argonne, I 11., 1969.

(42.8) 到 (42.11) 概括了基态能量移动的梯形贡献中的这样一部分，其中的中间对偶总是作为 Fermi 海以上的粒子传播.

11.12 (a) 验证方程 (43.8).

(b) 保留方程 (43.8) 中所有的项，采用 41.2 所示的非奇异方阱 $^1S_0$ 势，求解能隙方程(43.6). 证明表 43.1 中的各数字减小大了约一个因子 4.

第十二章　声子和电子

前面关于相互作用电子气的讨论，把均匀的正电背景当作惰性系统来处理，这系统的唯一作用是保证总的电中性．本章将研究这种背景的动力学以及它的激发模与电子气的相互作用．所得到的关于背景的 Debye 模型，构成晶体的一般研究的出发点，而模型电子-声子系统则提供研究金属的极好基础．当然，在实际的固体中，离子背景形成晶格；对于声频支简正模激发，其波长比离子间距长得多（这对几乎所有的重要激发都是符合实际的），离子晶格的这种不连续结构幸好并不重要．

44. 无相互作用声子系统

我们把背景近似当成是均匀的各向同性弹性介质．从可变形固体力学的一般理论[1]知道，这样的介质既能支持横（切变）波，也能支持纵（压缩）波．只有纵模导致密度的改变，这种改变对于电子与背景之间库仑作用的修改是必需的．这样，为了当前的目的，我们把模型进一步简化，假定背景没有切变强度而完全由绝热体积弹性模量决定，这模量为

$$B \equiv -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_s , \tag{44.1}$$

1) G. Joos, "Theoretical Physics", 2d ed., Ch. VIII, Hafner Publishing Company, New York, 1950.

就好像它是均匀流体似的．我们将假定 B 为已知的，虽然事实上它是由晶格的势能决定的，晶格的势能则又自洽地取决于离子间的原子作用和静电作用以及离子与电子的作用．

离子质量很大，这导致一个重要的简化，可把问题分作截然的两步来处理．第一步，离子运动的幅度很小意味着，计算电子行为时，可认为离子固定在它们的平衡位置上．第二步，研究一系列这种稳定的离子组态的能量差别以决定低频离子运动，假定电子的波函数随时适应于当时的离子组态．因此，作为好的近似，电子系统和离子系统的耦合被解除[1]．作为这种分解的简单例子，可回想均匀正电背景中简并电子气的 B 的计算(第 3 节)．在那个情况下，基态能量 $E(r_s)$ 是作为背景的密度的函数来计算的；对应于平衡密度的体积弹性模量正比于 $E(r_s)$ 在 $(r_s)_{\min} = 4.83$ 的曲率，我们求得

$$(B)_{\min} = 4.5 \times 10^{-5}\frac{e^2}{2a_0^4} = 0.66 \times 10^{10} \text{ 达因/厘米}^2.$$

第 16 节的讨论表明质量密度的变化 $\delta\rho_m$ 遵守运动方程

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta\rho_m = \nabla^2\delta\rho_m, \tag{44.2}$$

这里

$$c^2 = \frac{B}{\rho_{m0}} = \frac{B}{Mn_0} \tag{44.3}$$

是声的纵向速率，而

$$\rho_{m0} \equiv Mn_0 \tag{44.4}$$

是背景的质量密度．波动方程(44.2)的解描写纵声波．我们还可以利用平衡密度下的简并电子气这个简单模型求得理论

1) 这是 Born-Oppenheimer 近似 [M. Born and J. R. Oppenheimer, *Ann. Physik*, **84**: 457 (1927)]，关于它的讨论，参看例如 L. I. Schiff, "Quantum Mechanics", 3d ed., p. 446, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968.

公式

$$c^2 = \frac{e^2}{2a_0}\frac{2}{9M}\frac{(0.916)^2}{4(2.21)}.$$

对于 $M = 23m_p$（这对钠是适当的），这公式给出 $c_{理论} = 1.1 \times 10^5$ 厘米/秒，是与 $c_{实验} = 2.3 \times 10^5$ 厘米/秒相当符合，后者是用钠的观测值[1] $B = 5.2 \times 10^{10}$ 达因/厘米^{2}和 $\rho_{m0} = 0.97$ 克/厘米^{3}算出的．既然理论曲线 $E(r_s)$［方程(3.37)的头两项］是变分估计值，它是真实的基态能量的上界，所以这计算所给出的极小处曲率大抵是偏小的，因而 B 和 c 的数值也是偏小的．

拉格朗日函数和哈密顿函数

从系统的拉格朗日函数容易得出声波的完整描述．首先，对介质中每一点，引入位移矢量 $\mathbf{d}(\mathbf{x})$，它表示离开平衡位置的位移．在变形时，体积元 $dxdydz$ 的改变就可从下式算到 $dxdydz$ 的最低级项，

$$dV' = dx'dy'dz' = dxdydz\left(1 + \frac{\partial d_x}{\partial x} + \frac{\partial d_y}{\partial y} + \frac{\partial d_z}{\partial z}\right),$$

或者说，到 $\mathbf{d}$ 的导数的第一级项，

$$dV' = dV(1 + \nabla \cdot \mathbf{d}).$$

到同一级，密度的改变是

$$\frac{\delta\rho_m}{\rho_{m0}} = \frac{\delta n}{n_0} = -\nabla \cdot \mathbf{d}, \tag{44.5}$$

因而波动方程可用 $\mathbf{d}$ 表出如

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{d}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{d}\right) = 0. \tag{44.6}$$

---

1) "American Institute of Physics Handbook," 2d ed., pp. 2—21, 3—89, McGraw-Hill Book Company, New York, 1963.

在没有切变强度和涡旋的弹性介质中，$\mathbf{d}$ 满足一般的条件

$$\oint_{\text{任意路径}} \mathbf{d} \cdot d\mathbf{l} = 0,$$

这意味着

$$\nabla \times \mathbf{d} = 0. \tag{44.7}$$

这样，我们作出结论

$$\nabla \times \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{d}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{d} \right) = 0. \tag{44.8}$$

方程 (44.6) 和 (44.8) 中的散度和旋度两者都是处处为零，因而声波可用下列一对方程描写

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{d}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{d} = 0, \tag{44.9}$$

$$\nabla \times \mathbf{d} = 0. \tag{44.10}$$

建立拉格朗日函数密度和拉格朗日函数，以给出这些运动方程[1]，现在已是简单的事情，

$$L_0 = T - V, \tag{44.11a}$$

$$L_0 = \frac{1}{2} \int d^3x \left(\rho_{m0} \frac{\partial d_i}{\partial t} \frac{\partial d_i}{\partial t} - B \frac{\partial d_i}{\partial x_j} \frac{\partial d_i}{\partial x_j} \right), \tag{44.11b}$$

这里下角拉丁指标 i，j 等，凡重复的均应取 1 到 3 并求和. Euler-Lagrange 方程给出方程 (44.9)，至于方程 (44.10) 则起辅助条件的作用，它保证是纵波. 通常的正规步骤使我们可以导出哈密顿函数

$$\boldsymbol{\pi}(x, t) = \rho_{m0} \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial t}, \tag{44.12}$$

$$H_0 = \frac{1}{2} \int d^3x [\rho_{m0}^{-1} \boldsymbol{\pi}^2 + B(\nabla \cdot \mathbf{d})^2], \tag{44.13}$$

---

1) 关于连续体力学，参看 H. Goldstein, "Classical Mechanics," chap. 11, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Mass., 1953.

这里曾把方程(44.10)代入方程(44.11b)的第二项，其结果又分部积分两次．引入简正模展开（取体积为 V 的大箱子并利用周期性的边界条件）

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}, t) = \rho_{m0}\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial t} \equiv -(Mn_0)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar\omega_k}{2V}\right)^{\frac{1}{2}} \times \frac{\mathbf{k}}{k}(c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t} + c_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega_k t}), \quad (44.14)$$

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{-i}{(Mn_0)^{\frac{1}{2}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_k V}\right)^{\frac{1}{2}} \times \frac{\mathbf{k}}{k}(c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_k t} - c_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega_k t}), \quad (44.15)$$

$$\omega_k = ck, \quad (44.16)$$

它现在以显式体现了条件 $\nabla \times \mathbf{d} = 0$．经过少许代数运算，哈密顿函数成为

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_k (c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger}), \quad (44.17)$$

这是**无耦合谐振子系统**[1]．虽然可以把对易关系施加于 $\boldsymbol{\pi}$ 和 $\mathbf{d}$，但辅助条件使得这样的步骤十分错综复杂；不这样而把 $c_{\mathbf{k}}$ 和 $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ 作为独立的正则变量要方便得多，因为辅助条件直接包括进来了．这样，我们利用正则对易关系进行量子化

$$[c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (44.18)$$

Debye 比热理论

方程(44.17)提供了研究自由声子系统的热力学和统计力学的基础．首先注意声子的化学势为零，

---

1) 这就是选定方程(44.14)和(44.15)中的特定系数的理由．

$$\mu_{ph} = 0, \tag{44.19}$$

这可用下述方式看出. 试考虑按固定声子数算出的 Helmholtz 自由能 $F(T, V, N_{ph})$. 既然声子数没有限制，系集在固定 T 和 V 的平衡态由 Helmholtz 自由能取极小而得出，

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N_{ph}}\right)_{TV} = 0. \tag{44.20}$$

这个式子正是化学势[方程 (4.6)]，因而验证了 (44.19). 这个玻色子集体的热力学势由下式给出[比较方程 (5.8)]

$$\Omega_0 = -k_B T \ln \mathrm{Tr}\left[\exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{k_B T}\right)\right], \tag{44.21a}$$

$$\Omega_0 = k_B T \sum_{\mathbf{k}} \left\{\ln\left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right)\right] + \frac{\hbar\omega_k}{2k_B T}\right\}, \tag{44.21b}$$

这里额外的一项来自哈密顿函数中的零点能，

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_k \left[c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\right].$$

既然 $\mu_{ph} = 0$，立刻导出

$$\Omega_0 = -PV = E - TS = E + T\left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial T}\right)_V,$$

或

$$E = -T^2 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\Omega_0}{T}\right)_V, \tag{44.22}$$

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \left\{\hbar\omega_k \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right) - 1\right]^{-1} + \frac{1}{2}\hbar\omega_k\right\}. \tag{44.23}$$

求和可按通常的方式转换为积分

$$\sum_{\mathbf{k}} \to \int d\omega g(\omega), \tag{44.24a}$$

$$g(\omega) = (2\pi^2)^{-1} V c^{-3} \omega^2, \tag{44.24b}$$

$$\omega = ck. \tag{44.24c}$$

在均匀介质中，频率 ω 没有上限．但在真实的晶体中，很明白，传播的波数不可能超过粒子间距的倒数．考虑到 N 个离子的真实晶体总自由度数为 $3N$，可以确定最大频率 ω_D．这样，

$$3N = \int_0^{\omega_D} g(\omega)d\omega, \tag{44.25}$$

这给出

$$g(\omega)d\omega = \frac{9N\omega^2 d\omega}{\omega_D^3}. \tag{44.26}$$

定义无量纲变数 $u = \hbar\omega/k_BT$ 和 Debye 温度

$$\theta \equiv \frac{\hbar\omega_D}{k_B}, \tag{44.27}$$

我们求得[1]

$$E = 9Nk_BT\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\int_0^{\theta/T}\frac{u^3du}{e^u-1} + \frac{9Nk_B\theta}{8}, \tag{44.28}$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = 9Nk_B\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\int_0^{\theta/T}\frac{u^4e^udu}{(e^u-1)^2}, \tag{44.29}$$

这就是 Debye 比热理论．[2] 方程 (44.29) 具有下列极限值

$$C_V = 3Nk_B \quad (T\to\infty). \tag{44.30a}$$

$$C_V = 9Nk_B\left(\frac{T}{\theta}\right)^3\int_0^{\infty}\frac{u^4e^udu}{(e^u-1)^2}$$

$$= \frac{12\pi^4}{5}Nk_B\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \quad (T\to 0). \tag{44.30b}$$

第一个正是经典理论中的能量均分原理的结果，第二个则是著名的 Debye T^3 定律．Debye 理论提供了晶体比热的优异

1) 注意这些式子中唯一依赖于体积的量是 ω_D.
2) P. Debye, *Ann. Physik*, **39**: 789 (1912).

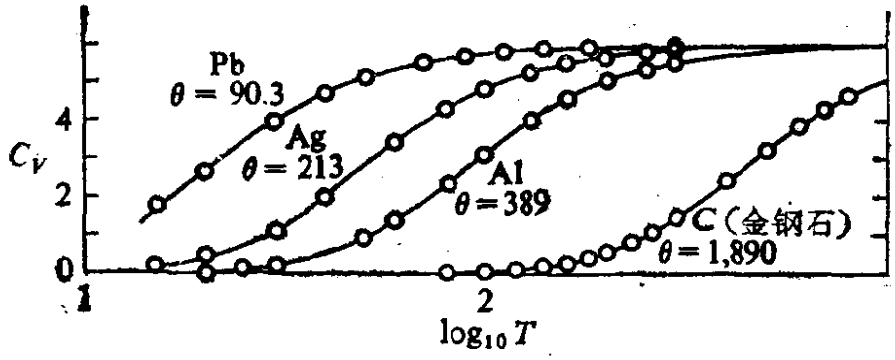


图 44.1 几个固体元素的比热，单位是卡/(K. 摩尔). 曲线是给定 θ 值下的 Debye 函数. (引自 N. Davidson, "Statistical Mechanics," p. 359, McGraw-Hill Book Company, New York, 1962, 据 G. N. Lewis and M. Randall, "Thermodynamics," 2d ed., K. S. Pitzer and L. Brewer 修订, p. 56, McGraw-Hill Book Company, New York, 1961.)

的单参数描述，如图 44.1 明显可见[1].

在表 44.1 中所比较的是跟比热数据相拟合的 θ 值以及从材料的弹性常数算出的 θ 值[2].

表 44.1 从热学的和弹性的测量得到的 Debye 温度 θ (单位:K)

	Fe	Al	Cu	Pb	Ag
热学值	453	398	315	88	215
弹性值(室温)	461	402	332	73	214
弹性值(绝对零度)		488	344		235

资料来源: G. H. Wannier, "Statistical Physics," p. 277, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1966.

1) 金属具有附加的正比于 T 的电子比热[见方程(29.31)]，它在很低的温度下 ($\approx$1K) 成为重要的。

2) 如已指出的，具有切变强度的弹性固体可以维持三种声波: 两种横模和这里所考虑的一种纵模. 这对上面的分析的唯一影响是把方程 (44.24b) 中的 $1/c^3$ 换作 $(2/c_t^2 + 1/c_l^2) \equiv 3/c_{av}^2$. 这仅仅改变 ω_D 对密度和声速的关系式[方程 (44.24b) 和 (44.26)]; 方程 (44.26) 和随后的分析保持不变.

45. 电子-声子作用

这个关于均匀背景动力学的简单模型（Debye 模型），使我们得以研究电子与背景的集体模之间的相互作用．相互作用哈密顿函数是第 3 节的

$$H_{el-b}=\int d^3x d^3x' \frac{\rho_{el}(\mathbf{x})\,\rho_b(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \tag{45.1}$$

这里 $\rho_b = zen$ 是背景电荷密度，z 是离子的价．用定义［见方程 (44.5)］

$$\rho_b = \rho_0 + \delta\rho_b, \tag{45.2}$$

$$\delta\rho_b = ze\delta n = -zen_0\nabla\cdot\mathbf{d} \tag{45.3}$$

方程 (45.1) 成为

$$H_{el-b}=H^0_{el-b}+\int d^3x d^3x' \frac{\rho_{el}(\mathbf{x})\delta\rho_b(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}. \tag{45.4}$$

第一项已包括于惰性均匀带电背景中电子气的哈密顿函数 $H_{el-\mathrm{gas}}$［方程 (3.19)］之中；第二项是电子-声子作用．为检验这个量，利用方程(2.8)和(45.3)并以 Schrödinger 图象的场展开式

$$\hat{\psi}(\mathbf{x})=\sum_{\mathbf{k}\lambda} V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\eta_\lambda a_{\mathbf{k}\lambda}, \tag{45.5a}$$

$$\hat{d}(\mathbf{x})=\frac{-i}{(Mn_0)^{\frac{1}{2}}}\sum_{\mathbf{k}}\left(\frac{\hbar}{2\omega_k V}\right)^{\frac{1}{2}} \times\frac{\mathbf{k}}{k}[c_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}-c^\dagger_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}]\theta(\omega_D-\omega_k) \tag{45.5b}$$

代入，这里 ω_D 是 Debye 频率．［注意方程(44.15)是在由 $\hat{H}_0$ 决定的相互作用图象中，以及 Debye 模型把声子谱截断于波数 ω_D/c．］这一步给出

$$\hat{H}_{el-ph} = \int d^3x d^3x' \frac{\hat{\rho}_{el}(\mathbf{x})\delta\hat{\rho}_b(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \tag{45.6a}$$

$$\hat{H}_{el-ph} = \frac{ze^2}{c}\left(\frac{n_0}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}\lambda}\sum_{\mathbf{q}}\left(\frac{\hbar\omega_q}{2V}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{4\pi}{\mathbf{q}^2}\theta(\omega_D-\omega_q)$$

$$\times [a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda}a_{\mathbf{k},\lambda}c_{\mathbf{q}} + a^\dagger_{\mathbf{k},\lambda}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda}c^\dagger_{\mathbf{q}}]. \tag{45.6b}$$

电子-声子的耦合正比于特征的库仑作用

$$U_0^c(\mathbf{q}) = 4\pi e^2\mathbf{q}^{-2}. \tag{45.7}$$

第 12 和 14 节的研究表明，由 $\hat{H}_{el-gas}$ 决定的介质中两电荷之间的有效作用，被介电常数修订为 $U^c(q) = U_0^c(\mathbf{q})/\kappa(q)$. 把具有电子之间反复的库仑作用的环形图累加（图 12.4），在这近似下，有效的静态库仑作用成为[1] [见方程 (12.65)]

$$U_r^c(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2 + q_{TF}^2} \quad (|q| \ll k_F), \tag{45.8}$$

这里 Thomas-Fermi 波数由方程 (12.67) 和 (14.13) 给出如

$$\frac{4\pi}{q_{TF}^2} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{\pi^2}{r_s k_F^2} = \frac{\pi^2 a_0}{k_F}. \tag{45.9}$$

从这个关系式很清楚，q_{TF}^{-1} 为晶格间隙的数量级；既然方程 (45.6b) 中的截止 ω_D/c 与这为同一数量级，几乎对于一切有意义的声子波数，都可取

$$U_r^c(\mathbf{q}) \approx 4\pi e^2 q_{TF}^{-2}. \tag{45.10}$$

在代换

$$\frac{4\pi}{\mathbf{q}^2} \to \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2 + q_{TF}^2} \approx \frac{4\pi}{q_{TF}^2}$$

下，方程 (45.6) 中的电子-声子作用可改写为

---

1) 虽然这方程只在高密度下 ($r_s \ll 1$) 才严格有效，一个较为普遍的处理也不过是把 $q_{TF}^2 = 3\Omega_{pl}^2/v_F^2$ 换为 Ω_{pl}^2/s^2，s 是第 3 节所考虑的模型中的准确的声速 (D. Pines and P. Nozières, "The Theory of Quantum Liquids," Vol. I, secs. 3.1 and 3.4, W. A. Benjamin,. Inc., New York).

$$\hat{H}_{el-ph} = \gamma \int d^3x \hat{\phi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x})\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \qquad (45.11)$$

这里已引进了下列定义，

$$\gamma \equiv \frac{ze^2}{c}\frac{4\pi}{q_{TF}^2}\left(\frac{n_0}{M}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{z\hbar^2\pi^2}{mk_F}\frac{n_0}{B^{\frac{1}{2}}}, \qquad (45.12)$$

$$\delta\hat{n}(\mathbf{x}) = -n_0\nabla\cdot\hat{d}(\mathbf{x}) \equiv -\frac{1}{c}\left(\frac{n_0}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\hat{\varphi}(\mathbf{x}). \qquad (45.13)$$

注意耦合常数 γ 与离子质量 M 无关，它的量纲为（能量×体积）$^{1/2}$。新的声子场 $\hat{\varphi}(\mathbf{x})$ 可在 Schrödinger 图象中写为

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}}\left(\frac{\hbar\omega_k}{2V}\right)^{\frac{1}{2}}[c_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + c^{\dagger}_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}] \times \theta(\omega_D - \omega_k). \qquad (45.14)$$

背景的密度变化也要引起它本身的库仑能量的变化如下：

$$H_b = \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' \frac{\rho_b(\mathbf{x})\rho_b(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \qquad (45.15a)$$

$$H_b = H_b^2 + \frac{1}{2}z^2e^2\int d^3x d^3x' \frac{\delta n(\mathbf{x})\delta n(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \qquad (45.15b)$$

这里第二个结果是由于 $\int d^3x\delta n(\mathbf{x}) = 0$。方程 (45.15b) 右边第一项已包括在 H_{el-gas} 之中。还有，第二项的被积函数中的库仑作用在大距离时会被屏蔽掉，而它在小距离的效应已包括在 B 中，B 假定为已知的。因此，这项将被忽略。

按这方式，我们达到了耦合电子-声子系统的（近似）哈密顿函数[1]

$$\hat{H} = \hat{H}_{el-gas} + \hat{H}_{ph} + \gamma\int d^3x \hat{\phi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x})\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{x})\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \qquad (45.16)$$

---

1) F. Bloch, *Z. Physik*, **52**: 555 (1928); H. Fröhlich, *Phys. Rev.*, **79**: 845 (1950); H. Fröhlich, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **215**: 291 (1952)。本节的方法基本按照后一篇文章。

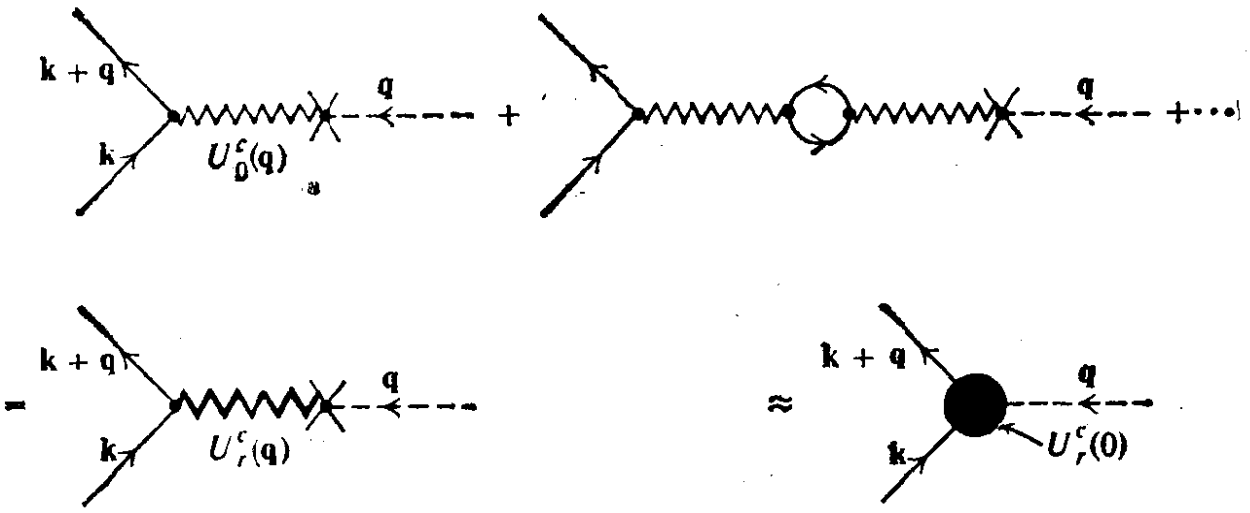


图 45.1　从裸的作用 $U_0^c(\mathbf{q})$（波线）到屏蔽电子-声子作用 $U_r^c(0)$ 所用的图解求和.

这里 $\hat{H}_{el-gas}$ 在第 3 节讨论过，而 $\hat{H}_{ph}$ 在第 44 节讨论过. 由于 $\hat{H}_{ph}$ 描写实际的声子，它们具有实验测出的长波色散关系；相互作用项清楚地代表电子与实际声子之间的耦合[1]. 不过，必须记住，裸的带有 $U_0^c(\mathbf{q})$ 的电子-声子哈密顿函数 [方程 (45.6 b)] 已被环形图解的和所屏蔽，如图 45.1 所示. 于是，所得的有效相互作用 $U_r^c(\mathbf{q})$ 近似为常数 $U_r^c(0)$，从而给出重正化的电子-声子哈密顿函数 (45.11). 在用方程 (45.16) 进行计算时，当然必须略去那些已包括在这个重正化过程中的图解.

---

1) 作为另一方法，离子和电子常常被认为是带电粒子的气体. 离子密度 $(\hbar^2/Me^2 \ll n_0^{-1/3})$ 很低，因而形成 Wigner 晶格，裸的纵声子的振动频率相当于离子的等离子体频率 $(4\pi n_0 z^2 e^2/M)^{1/2}$. 不过，引进环形图解，将屏蔽掉奇异的库仑作用，从而得出所观察到的声子谱. 这模型也可以改进弹性常数的计算，使与实验值符合得很好. 参看，例如，J. Bardeen and D. Pines, *Phys. Rev.*, **99**: 1140 (1950); T. D. Schultz, "Quantum Field Theory and the Many-Body Problem," chap. IV, Gordon and Breach, Science Publishers, New York, 1964; J. R. Schrieffer, "Theory of Superconductivity," sec. 6.2, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1964.

46. 耦合场理论

为了简化随后的讨论，我们将在 Hartree-Fock 近似中处理电子之间的库仑作用，并考察

$$\hat{H}_{\text{model}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda>k_F} \epsilon_{\mathbf{k}} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda} - \sum_{\mathbf{k}\lambda<k_F} \epsilon_{\mathbf{k}} b^{\dagger}_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda}$$
$$+ \sum_{\mathbf{k}<\omega_D/c} \left(c^{\dagger}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{\mathbf{k}}$$
$$+ \gamma \int d^3x \hat{\psi}^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}), \qquad (46.1)$$

这里的 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 现在是电子气的 Hartree-Fock 单电子能量.[1]现在的处理集中于系统的零温度性质，至于向有限温度的推广则留作习题. 我们现在希望考察方程(46.1)所规定的耦合系统的 Green 函数. 这样作的动机同前；Green 函数给出任意单体算符的期待值，Green 函数的极点给出系统的准确激发能，相互作用系统的基态能量移动可按照方程 (7.30) 从电子 Green 函数算出，

$$E - E_0 = -V \int_0^{\gamma} \frac{d\gamma'}{\gamma'} \lim_{\eta\to 0^+} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4}$$
$$\times (\hbar q_0 - \epsilon_{\mathbf{q}}) i G^{\gamma'}_{\alpha\alpha}(q) e^{iq_0\eta}, \qquad (46.2)$$

这里 E_0 是无耦合的电子-声子系统的基态能量. (没有因子 1/2，因为这里的作用正比于 $\hat{\psi}^{\dagger}\hat{\psi}$.) 此外，Green 函数还描写系统对外界微扰的线性响应.

$T = 0$ 时的 Feynman 规则

第三章的一般场论就像以前一样地适用. 在相互作用图

1) 为了计及环形图解求和的效应，这些能量在 Fermi 表面必须适当地加以平滑化(见习题 8.2).

象中，由于有 Wick 定理，可以分解为 Feynman 图解，而且只需考虑连结图解. 我们将只是叙述任意的过程在动量空间中的 Feynman 规则[1].

1. 作出所有拓朴不同的 Feynman 图解，基本的顶点是电子发射或吸收声子，如图 46.1 所示.

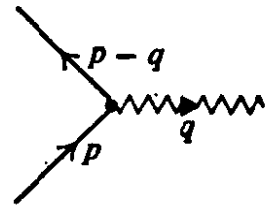


图 46.1 基本的电子-声子顶点.

2. 为微扰论的每一级，指派一个因子 $-i\gamma/\hbar$.

3. 为每根电子线，计入因子 $i(2\pi)^{-4}G^0_{\alpha\beta}(q)$，这里

$$G^0_{\alpha\beta}(\mathbf{q},q_0)=\delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(|\mathbf{q}|-k_F)}{q_0-\epsilon_{\mathbf{q}}/\hbar+i\eta}+\frac{\theta(k_F-|\mathbf{q}|)}{q_0-\epsilon_{\mathbf{q}}/\hbar-i\eta}\right], \tag{46.3}$$

并沿着电子线取自旋矩阵积.

4. 为每根声子线，计入因子 $i(2\pi)^{-4}D^0(q)$. 为计算声子传播函数，我们必须考察

$$\begin{aligned} iD^0(x-x') &\equiv \langle 0|T[\hat{\varphi}_I(x)\hat{\varphi}_I(x')]|0\rangle \\ &= \begin{cases} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_k}{2V} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')}\theta(\omega_D-\omega_{\mathbf{k}}) \\ \qquad\qquad (t>t'), \\ \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_k}{2V} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')+i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')}\theta(\omega_D-\omega_{\mathbf{k}}) \\ \qquad\qquad (t<t') \end{cases} \end{aligned} \tag{46.4}$$

---

1) 注意，由于这些 Feynman 规则是普遍的，这里给出的形式稍微不同于第 9 节和第 25 节. 为构成 Green 函数 $iG_{\alpha\beta}(q)$ 或 $iD(q)$，对于端线之一必须加记一个因子 $(2\pi)^4\delta^{(4)}(q-q')$（参看图 9.10 及伴随的讨论）；例如，对 $iD(q)$ 的最低级贡献是

$$\int d^4q' i(2\pi)^{-4}D^0(q')(2\pi)^4\delta^{(4)}(q-q')=iD^0(q).$$

及其 Fourier 变换

$$iD^0(x-x') \equiv (2\pi)^{-4}\int d^4q e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} iD^0(q), \quad (46.5)$$

这可写成

$$\begin{aligned} D^0(q) &= \frac{1}{2}\hbar\omega_{\mathbf{q}}\left(\frac{1}{q_0-\omega_{\mathbf{q}}+i\eta}-\frac{1}{q_0+\omega_{\mathbf{q}}-i\eta}\right) \\ &\quad \times \theta(\omega_D-\omega_{\mathbf{q}}) \\ &= \hbar\frac{\omega_{\mathbf{q}}^2}{q_0^2-(\omega_{\mathbf{q}}-i\eta)^2}\theta(\omega_D-\omega_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (46.6)$$

5. 在每个顶点，按 $(2\pi)^4\delta^{(4)}\left(\sum_i q_i\right)$，使频率与波矢守恒.

6. 沿着所有内线积分 $\int d^4q$.

7. 计入因子 $(-1)^F$，这里 F 是闭合费米子环线的数目.

8. 所有像图 46.2 的图解，就是有一个子单元跟图形的其余部分仅仅通过一根声子线相连的，都应弃去.这结果来自动量守恒，由动量守恒可知这根声子线的动量必须是 $q=0$，而方程(46.6)表明，对于任一有限的 η，$D^0(q=0)\equiv D^0(0)=0$. 更一般地说，我们注意到 $D^0(\mathbf{q}=0, q_0)=0$，因为基本场 $\hat{\varphi}$ 正比于 $\nabla\cdot\hat{\mathbf{d}}$；因而 $\hat{\varphi}$ 遍及整个空间的积分恒等于零.

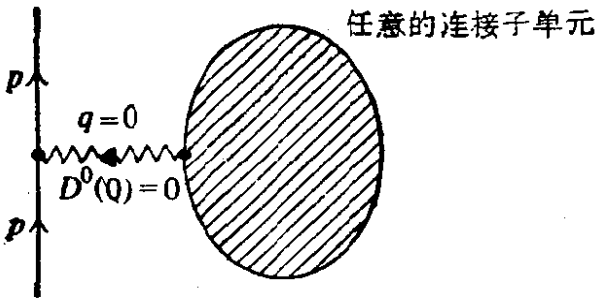


图 46.2 一般的蝌蚪图解，它等于零

等效电子-电子作用

这些关于声子交换的规则使我们可以把电子 Green 函数的所有声子交换 Feynman 图解一一对应于等效的自旋无关势的 Feynman 图解(图 46.3)，这势由下式给出[1)]

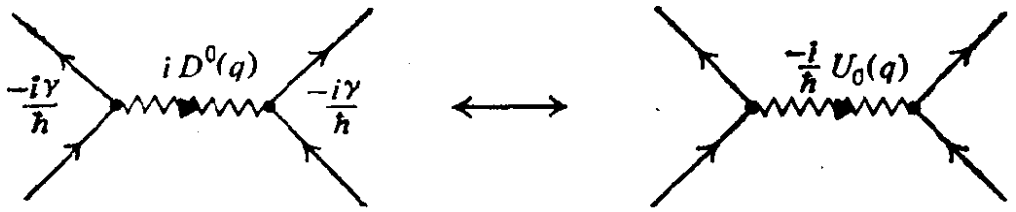


图 46.3　电子-声子问题中的等效电子-电子势的验证.

$$U_0(\mathbf{q},q_0) \equiv -i\hbar^{-1}\gamma^2 iD^0(q) = \gamma^2\hbar^{-1}D^0(q), \qquad (46.7\,\mathrm{a})$$

$$U_0(\mathbf{q},\,q_0) = \gamma^2\frac{\omega_\mathbf{q}^2}{q_0^2-(\omega_\mathbf{q}-i\eta)^2}\theta(\omega_D-\omega_\mathbf{q}). \qquad (46.7\,\mathrm{b})$$

这势甚至在最低级中已是依赖于频率的. 在静态极限，方程 (46.7 b) 归结为

$$U_0(\mathbf{q},\,0) = -\gamma^2\theta(\omega_D-\omega_\mathbf{q}) \equiv \int d^3x\,e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}V_{eq}(\mathbf{x}). \qquad (46.8)$$

既然 ω_D/c 与 k_F 大小差不多，几乎在一切有关的情况中都可以忽略上截止. 如对一切 $\mathbf{q}$，假定 $U_0(\mathbf{q},\,0) = -\gamma^2$，则等效的电子间势成为吸引的 δ 函数，

$$V_{eq}(\mathbf{x}) = -\gamma^2\delta(\mathbf{x}). \qquad (46.9)$$

靠近 Fermi 表面的粒子之间的吸引作用的后果，已在第 36 和 37 节中讨论过，并将在第十三章中详细研究. 从方程 (46.7 b) 看，这也是很清楚的：当能量转移 q_0 满足 $|q_0| > \omega_\mathbf{q}$ 时，$U_0(\mathbf{q},\,q_0)$ 不再是吸引的. 既然 $\omega_\mathbf{q} < \omega_D$，就有

1) 电子之间的声子交换势最先由 H. Frölich 加以讨论，*Phys. Rev.*，前引文.

$$U_0(\mathbf{q}, q_0) > 0 \quad (\text{如} |q_0| > \omega_D). \tag{46.10}$$

在无相互作用的基态，电子形成填满的 Fermi 海，只有对于 Fermi 表面以下厚度为 $\hbar\omega_D$ 的能量壳层中的电子，$U_0(\mathbf{q}, q_0)$ 才可能是吸引的，因为只有这些电子才可能激发到未被占据的能级而其能量转移小于 $\hbar\omega_D$. 同理，只有当电子对偶被激发到 Fermi 表面以上而厚度为 $\hbar\omega_D$ 的能量壳层中的未被占据状态时，$U_0(\mathbf{q}, q_0)$ 才可能是吸引的.

顶点部分与 Dyson 方程

耦合场理论的图形结构可用一组方程简洁地进行求和，这些方程首先由 Dyson[1] 在量子电动力学中[2] 导出. 这些非线性积分方程包含准确的传播函数和顶点. 将迭代过程一直进行下去，直到耦合常数的任意给定级，就重现 Feynman-Dyson 微扰论. 但 Dyson 方程并不仅仅是微扰论的一个方便的概括，由于它们的一般性，可用来寻求非微扰解.

电子正规自能已在第 9 节讨论过. 声子正规自能 $\Pi^\star$ 是按完全类似的方式引入的，所导致的方程形式上等同于第 9 节的有效作用传播函数.

$$G = G^0 + G^0\Sigma^\star G, \tag{46.11}$$

$$D = D^0 + \gamma^2\hbar^{-1}D^0\Pi^\star D, \tag{46.12}$$

这里 $\Pi^\star$ 用方程(46.7)的有效势来计算. 但是，有一个重要的新元素，叫作顶点部分，其定义是图解的某一部分，它与其余

1) F. J. Dyson, *Phys. Rev.*, **75**: 486 (1949); **75**: 1736 (1949).

2) 事实上，量子电动力学的 Feynman-Dyson 微扰论形式上等同于电子-声子问题，主要的不同在于传播函数的形式. 此外，有奇数根电子线连结于闭合费米子环线的这种图解在量子电动力学中是没有的；按照 Furry 定理 [W. Furry, *Phys. Rev.*, **51**: 125 (1937)]，由于电荷共轭，这种过程为零. 根据十分不同的理由(见本节 Feynman 规则 8)，电子-声子系统没有那种闭合电子环线，它与图解中其余部分由一根声子线相连. 因此，两种场论都没有蝌蚪图解.

部分由两根费米子线和一根声子线相连．两个例子示于图46.4．由动量守恒可知，顶点部分取决于两个独立的动量；所

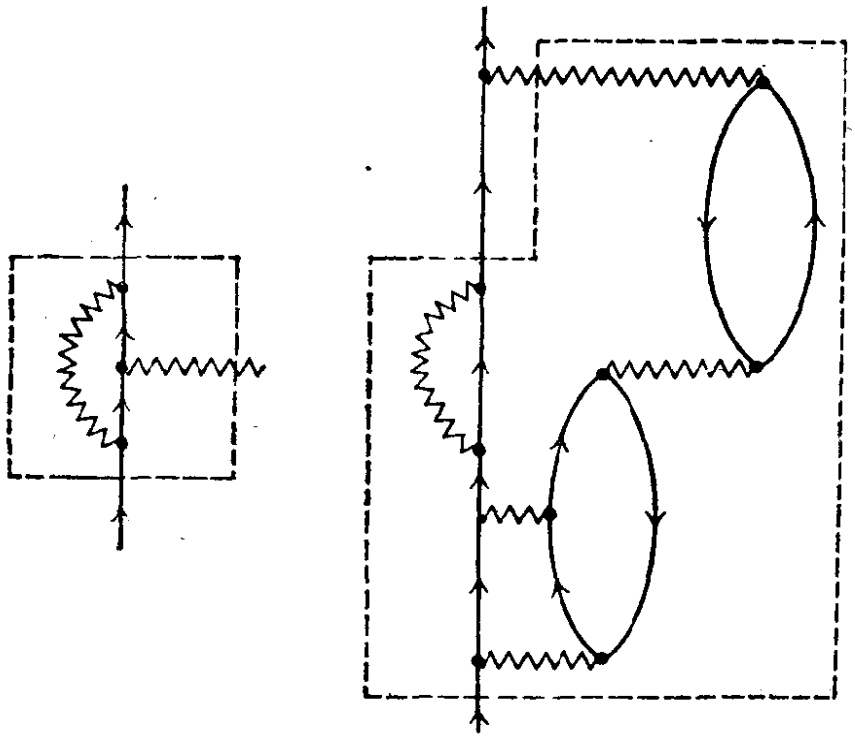


图 46.4　典型的顶点部分：（a）正规　（b）非正规．

有的自旋指标可以删掉，因为相互作用是与自旋无关的．正规顶点部分定义为顶点的外线上没有自能的部分．这样，图46.4的第二个图解是非正规的，因为在费米子和声子线上都插入了自能．

为得出 Dyson 方程，现在设法用正规顶点和正规自能部分写出 Green 函数的积分方程．任取一个具有任意根外线的 Feynman 图解，并且

1. 除去所有电子自能插入部分．
2. 除去所有声子自能(极化)插入部分．
3. 除去所有顶点插入部分．

剩下来的叫作不可约图解或骨架图解．正规自能和顶点部分

本身的不可约图解定义为，上述步骤进行到最后地步时剩下的图解，进一步的简约将分别导致简单的一根线或一点．一些例子示于图 46.5．最低级的费米子自能、声子极化部分、顶点改正就定义为它们本身的骨架图形．我们现在认为：

1. 每个图解有唯一的骨架．

2. 在所有骨架图解中插入准确的 Green 函数 G，声子传播函数 D，正规顶点部分 Γ，可以构成一切图解．

例如，$\Sigma^*(q)$ 和 $\Pi^*(q)$ 两者都只有一个骨架，即图 46.5a 和 b 所示的骨架，把准确的 G，D 和 Γ 插入这些骨架可得到对 $\Sigma^*(q)$ 和 $\Pi^*(q)$ 的一切贡献，如图 46.6 所指出．注意只能在这些骨架的一端插入准确的正规顶点；否则某些图解将被计数两次．例如，图 46.5 b 所示类型的图只有一个，但如果在图 46.6 的两端都插入准确的顶点，这图将出现两次．

剩下的问题是写出准确的正规顶点的方程．不幸的是，

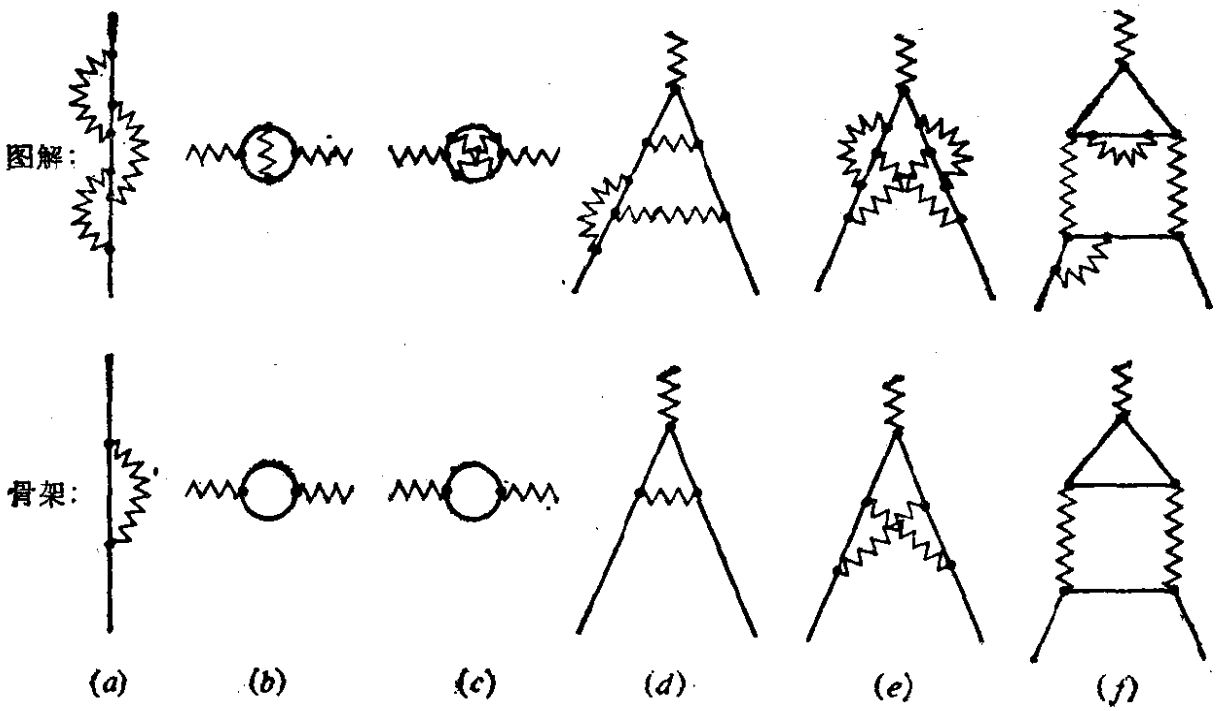


图 46.5　Feynman 图解简约为其骨架．

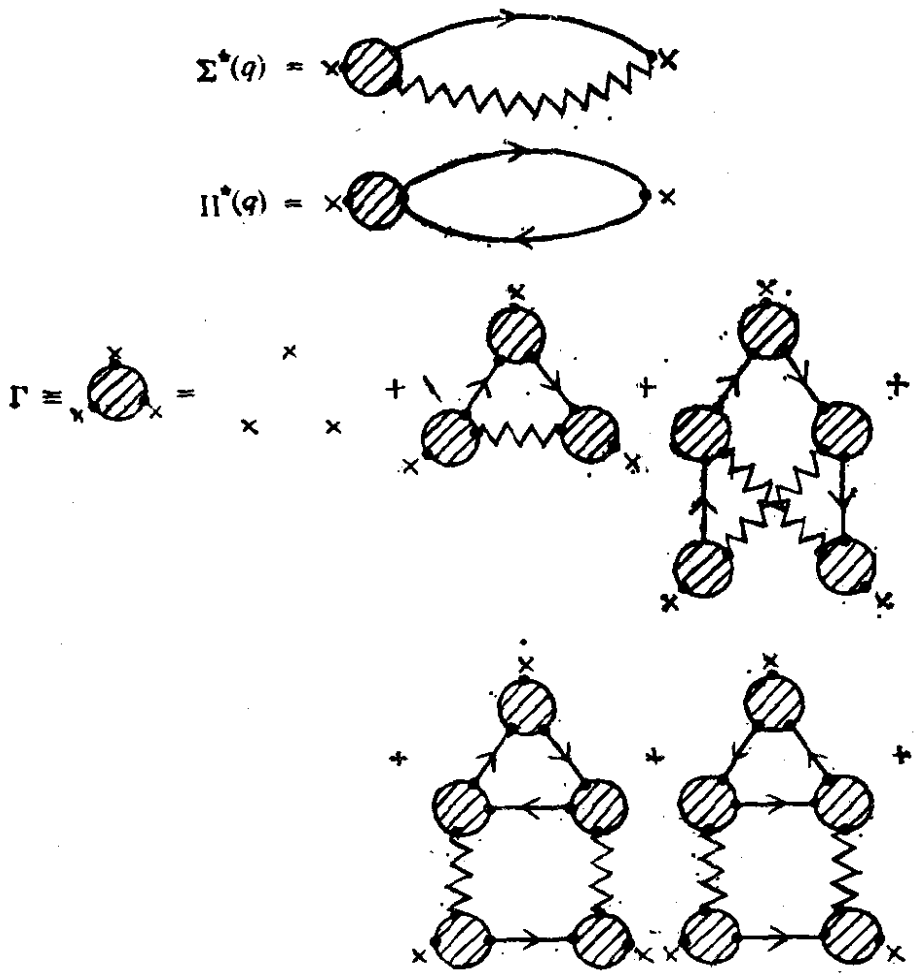


图 46.6　电子–声子系统的 Dyson 方程

这个目的不可能以闭合的形式达到，因为有无限多个不可约骨架顶点图形. 因此我们必须依靠级数展开，其开头的少数几项示于图 46.6中[1]. 最低级的顶点，图中用一点表示的，就是 γ，而改正后成为

$$\Gamma = \gamma(1 + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(4)} + \cdots). \qquad (46.13)$$

对这些方程进行迭代，直到把相互作用强度计算到 γ^5 级，在第二个图解中所插入的传播函数和顶点改正必须算到 γ^2 级，而在后三个图解中却可以用最低级的结果，因为它们显然已

1) 在图 46.6 中约定电子线从左进入而从右出去.

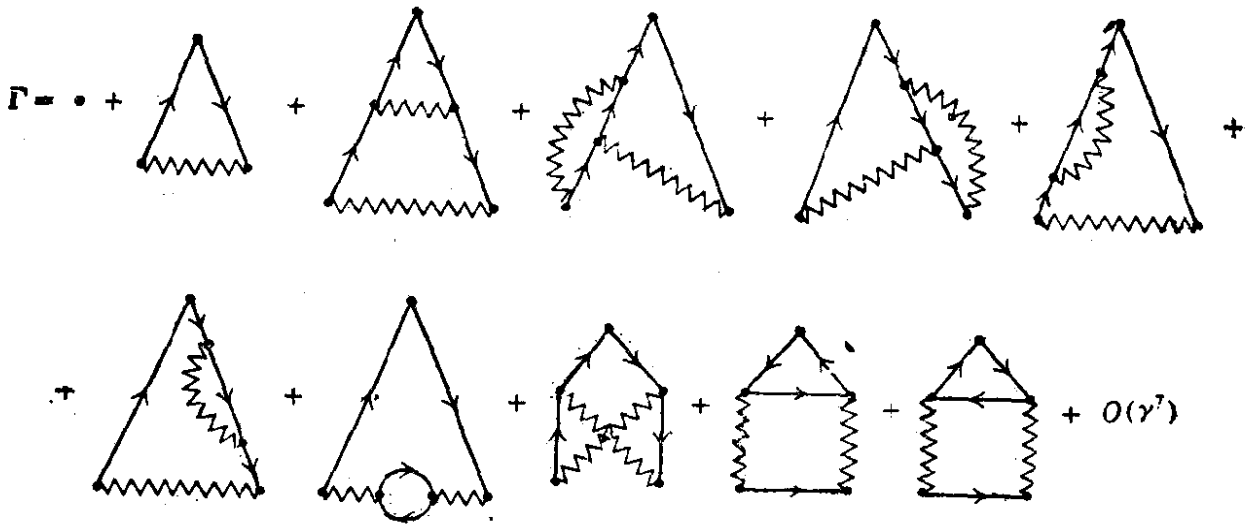


图 46.7　到 γ^5 级的正规顶角 Γ.

是 γ^5 级. 这迭代过程给出图 46.7 所示的展开，它包含直到 γ^5 级的一切顶点部分. 现在可以把这些结果合在一起，得到图 46.6 所示的非线性的 Dyson 耦合积分方程组. 虽然我们没有给出推导，但我们认为，这看来是可信的：把 Dyson 积分方程继续进行迭代直到 γ 的任意的给定级，将重现 Feynman-Dyson 微扰论.

Dyson 方程的组元是准确的 Green 函数 G 和 D 以及准确的正规顶点 Γ. 因此，有可能设法直接求解这些方程而并不依靠微扰论. 对于正常金属中通过声子交换而相互作用的电子，这样的方法可用 Migdal 所导出的值得注意的定理[1]

$$\Gamma = \gamma\left\{1 + O\left[\left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right\} \tag{46.14}$$

大大简化，这里 m/M 是电子质量与离子质量之比. 作为一个优良的近似，方程(46.14)使我们可以把顶点换作它的点值 γ，问题于是归结为 G 和 D 的耦合方程. 相应的解的详细讨论已

1) A. B. Migdal, *Soc. Phys.-JETP*, **7**: 996 (1958).

超出本书的范围，读者欲知其详可参看文献[1]。不过，我们将以关于 Migdal 定理的讨论结束本章.

47. Migdal 定 理[2]

Migdal 定理说，电子-声子系统的准确顶点满足方程 (46.14)，其中 m/M 是电子质量与离子质量之比. 我们不拟在一切级中证明这个结果，而仅仅证明它对第一个顶点改正是正确的. 这个计算作为例子解释了定理所包含的物理思想，而且把证明推广到高级项并不需要新的原理[3]。

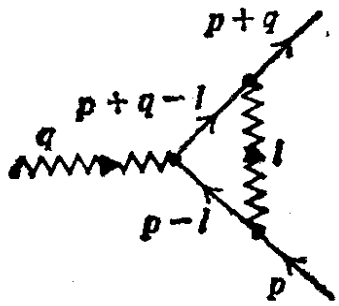


图 47.1 第二级顶点改正.

第一个顶点改正，在方程 (46.13) 中记作 $\Gamma^{(2)}$ 且示于图 47.1，可用 Feynman 规则写为

$$\Gamma^{(2)}(p+q,p)=\frac{i\gamma^2k_F^3}{\varepsilon_F^0}\int\frac{d^4l}{(2\pi)^4}\frac{\omega_{\mathbf{l}}^2}{l_0^2-(\omega_{\mathbf{l}}-i\eta)^2}$$
$$\times\left[\theta(\omega_D-\omega_{\mathbf{l}})\right]\Big/\Big\{[p_0-l_0-\varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{l}}+i\eta S(\mathbf{p}-\mathbf{l})][p_0$$
$$+q_0-l_0-\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l}}+i\eta\,S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l})]\Big\}. \qquad (47.1)$$

1) 参看例如 J. R. Schrieffer，前引书; G. M. Eliashberg, *Soc. Phys.-JETP*, **16**: 780 (1963).

2) A. B. Migdal，前引书.

3) 事实上，Migdal 满足于断言“可以证明，计及高级图解时，这个估计并不改变.”(A. B. Migdal，前引文.)

这里，积分现在是无量纲的，所有的波数均以 k_F 为单位，所有的频率以 $\epsilon_F^0/\hbar = \hbar k_F^2/2m$ 为单位，而

$$S(\mathbf{q}) \equiv \begin{cases} +1 & (|\mathbf{q}| > 1), \\ -1 & (|\mathbf{q}| < 1). \end{cases} \tag{47.2}$$

用这些单位，声子频率正比于因子 $(m/M)^{\frac{1}{2}}$，

$$\omega_l = \left(\frac{2m}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{B}{n_0 \epsilon_F^0}\right)^{\frac{1}{2}} |\mathbf{l}|, \tag{47.3}$$

而最大波数 $l_{\max} = \omega_D/c$ 是纯数 [参看方程 (44.24b)和(44.26)]

$$l_{\max} = (6/z)^{\frac{1}{3}}. \tag{47.4}$$

注意 $\Gamma^{(2)}$ 只是通过 ω_l 从而通过声速而依赖于离子质量. 与此相反，体积弹性模量 B 只依赖于晶体的势能面而与 M 无关. 声子传播函数的分子具有因子 ω_l^2，对频率的积分最多把这降低一次幂{就是说，$(2\pi i)^{-1}\int dl_0 \omega_l^2 [l_0^2 - (\omega_l - i\eta)^2]^{-1} = -\frac{1}{2}\omega_l$}；因此，剩下的顶点改正的表示式仍然对 ω_l 为线性并因而对 $(m/M)^{\frac{1}{2}}$ 为线性的. 这个事实，就为 Migdal 定理提供了基础.

现在就 $\Gamma^{(2)}$ 进行验证，先计算 $\Gamma^{(2)}$ 中的沿 l_0 积分，积分迴路或在 l_0 的上半平面或在下半平面闭合. 经过某些熟悉的代数运算，结果可写成形式

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(p+q, p) = \frac{\gamma^2 k_F^2}{2\epsilon_F^0} \int \frac{d^3 l}{(2\pi)^3} \omega_l \theta(\omega_D - \omega_l) \\ \times \left\{ \frac{1}{q_0 + \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{l}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l}} + i\eta [S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l}) - S(\mathbf{p}-\mathbf{l})]} \right. \\ \times \left[\frac{1}{p_0 - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{l}} - (\omega_l - i\eta) S(\mathbf{p}-\mathbf{l})} \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{p_0 + q_0 - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l}} - (\omega_l - i\eta) S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l})} \right] \right\}. \end{aligned} \tag{47.5}$$

如把曲括号中的函数记作 $f(\omega_1)$，这个式子可改写为

$$\Gamma^{(2)}(p+q,p)=\frac{\gamma^2k_F^3}{2\varepsilon_F^0}\int\frac{d^3l}{(2\pi)^3}\omega_1\theta(\omega_D-\omega_1)$$
$$\times\{f(0)+[f(\omega_1)-f(0)]\}. \quad (47.6)$$

倘若包含 $f(0)$ 的积分收敛，略去包含 $f(\omega_1)-f(0)$ 的第二项可以得到 $(m/M)^{\frac{1}{2}}$ 很小时的极限表示式. 于是，证明归结为说明 $(m/M)^{\frac{1}{2}}\to 0$ 的极限表示式

$$\Gamma^{(2)}(p+q,p)\approx\frac{\gamma^2k_F^3}{2\varepsilon_F^0}\left(\frac{2m}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{B}{n_0\varepsilon_F^0}\right)^{\frac{1}{2}}\int\frac{d^3l}{(2\pi)^3}l\theta(l_{\max}-l)$$
$$\times\frac{1}{p_0-\varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{l}}+i\eta S(\mathbf{p}-\mathbf{l})}$$
$$\times\frac{1}{p_0+q_0-\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l}}+i\eta S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l})} \quad (47.7)$$

具有确定意义，因为无量纲积分前的因子 $(m/M)^{\frac{1}{2}}$ 就给出所要的结果.

可是，方程 (47.7) 的式子就像 $T=0$ 理论中所出现的任意一个关于费米子 Green 函数的积分那样具有确定意义. Debye 截止把动量积分限制于有限的区域，从而消除了在大 l 处的任何发散性. 此外，真实的晶体在声子谱的高频端具有平缓的截止，所以由尖锐的 Debye 截止所造成的任何对数式奇异性都是虚假的. 还有，方程 (47.7) 在 $q_0=\mathbf{q}=p_0=\mathbf{p}=0$ 的红外发散 [这可以造成正比于 $(m/M)^{\frac{1}{2}}\ln(m/M)^{\frac{1}{2}}$ 的项]是谈不上的，因为弱的声子作用只有对于靠近 Fermi 面的电子才是重要的，而在那里 $|\mathbf{p}|\approx 1$.

剩下的唯一困难来自方程 (47.7) 的被积函数的奇点. 虽然每一个奇点单独地给出有限的积分，但当两个奇点合到一起，所得的式子却可能是发散的. 用下面一系列步骤可把这个范围里的贡献孤立出来.

1. 只有当分母的实部为零时，无限小的虚部才是有关系的. 这样，可把 $S(\mathbf{p}-\mathbf{l})$ 和 $S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l})$ 换成 $\mathscr{A}(p_0)$ 和 $\mathscr{A}(p_0+q_0)$，这里 $\mathscr{A}(p_0)$ 定义为

$$\mathscr{A}(p_0)\equiv\begin{cases}+1 & (p_0>\epsilon_F),\\ -1 & (p_0<\epsilon_F).\end{cases}$$

这里 $\epsilon_F\equiv\epsilon_{|\mathbf{p}|=1}$，而 $\partial\epsilon_{\mathbf{p}}/\partial|\mathbf{p}|$ 假定为正的.

2. (47.7) 的被积函数的径向部分包含因子 l^3dl，这使得 $l\approx l_{\max}$ 的区域的权重最大. 作为简单的近似，把一个因子 l 换成它在 $l_{\max}$ 的值，然后变换到新的积分变量 $\mathbf{t}\equiv\mathbf{p}-\mathbf{l}$. 对于大 t，$\epsilon_t\propto t^2$，则剩下的积分收敛；既然如此，我们把 $\mathbf{t}$ 积分扩展到遍及全空间.

3. 第二个分母中的能量 $\epsilon_{\mathbf{t}+\mathbf{q}}$ 在值 $\epsilon_{\mathbf{t}}$ 附近展开为

$$\epsilon_{\mathbf{t}+\mathbf{q}}\approx\epsilon_{\mathbf{t}}+\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{t}}\frac{\partial\epsilon_t}{\partial t}+\cdots$$

在这三步以后，方程 (47.7) 的奇异部分 $\Gamma_S^{(2)}$ 成为

$$\Gamma_S^{(2)}(p+q,p)\approx\frac{\gamma^2k_F^3}{2\epsilon_F^0}\left[\omega_D\int\frac{d^3t}{(2\pi)^3}\frac{1}{p_0-\epsilon_t+i\eta\mathscr{A}(p_0)}\right.$$
$$\left.\times\frac{1}{p_0+q_0-\epsilon_t-\mathbf{q}\cdot\mathbf{t}\partial\epsilon_t/\partial t+i\eta\mathscr{A}(p_0+q_0)}\right],$$

现在把对 $\hat{t}$ 的角度积分算出，

$$\Gamma_S^{(2)}(p+q,p)\approx\frac{\gamma^2k_F^3}{8\pi^2\epsilon_F^0}\left[\frac{\omega_D}{q}\int_0^\infty\frac{t^2dt}{p_0-\epsilon_t+i\eta\mathscr{A}(p_0)}\left(\frac{\partial\epsilon_t}{\partial t}\right)^{-1}\right.$$
$$\left.\times\ln\frac{p_0+q_0-\epsilon_t+q\partial\epsilon_t/\partial t+i\eta\mathscr{A}(p_0+q_0)}{p_0+q_0-\epsilon_t-q\partial\epsilon_t/\partial t+i\eta\mathscr{A}(p_0+q_0)}\right]. \quad (47.8)$$

4. 为研究奇点并合的区域，缓变函数 t^2 和 $\partial\epsilon_t/\partial t$ 就用它们在第一个奇点 $\epsilon_t=p_0$ 的值计算. 用新变量 $\zeta\equiv\epsilon_t-p_0$，方程 (47.8) 归结为

$$\Gamma_S^{(2)}(p+q,p)\approx -\frac{\gamma^2 k_F^3}{32\pi^2\varepsilon_F^0}\left[\left(\frac{\partial\varepsilon_t}{\partial t^2}\right)^{-2}_{\varepsilon_t=p_0}\frac{\omega_D}{q}\right.$$

$$\times\int_{\varepsilon_0-p_0}^{\infty}\frac{d\zeta}{\zeta-i\eta^{\sigma}(p_0)}$$

$$\left.\times\ln\frac{\zeta-q_0-q(\partial\varepsilon_t/\partial t)_{\varepsilon_t=p_0}-i\eta^{\sigma}(p_0+q_0)}{\zeta-q_0+q(\partial\varepsilon_t/\partial t)_{\varepsilon_t=p_0}-i\eta^{\sigma}(p_0+q_0)}\right].$$

只有对于 $p_0>\varepsilon_0$，其时积分区间包含原点，在 $\zeta=i\eta^{\sigma}(p_0)$ 的奇点才是重要的．在这情况下，把积分扩展到$-\infty$并用迴路积分方法算出，奇异性的结构并不改变．如 $^{\sigma}(p_0)$ 和 $^{\sigma}(p_0+q_0)$ 同号，积分迴路明显地可在不含奇点的半平面闭合，从而积分为零．

5．这样，$^{\sigma}(p_0)$ 和 $^{\sigma}(p_0+q_0)$ 必须异号才给出非零值．这时，积分迴路可在包含极点 $\zeta=i\eta^{\sigma}(p_0)$ 的半平面闭合，对于 $p_0>\varepsilon_0$ 的最后结果是(重新引入有量纲的单位)

$$\Gamma_S^{(2)}(p+q,p)\approx\frac{\gamma^2\omega_D\hbar}{16\pi iq}\,^{\sigma}(p_0)\left(\frac{\partial\varepsilon_t}{\partial t^2}\right)^{-2}_{\varepsilon_t=\hbar p_0}$$

$$\times\ln\frac{\hbar q_0+q(\partial\varepsilon_t/\partial t)_{\varepsilon_t=\hbar p_0}+i\eta^{\sigma}(p_0+q_0)}{\hbar q_0-q(\partial\varepsilon_t/\partial t)_{\varepsilon_t=\hbar p_0}+i\eta^{\sigma}(p_0+q_0)}.\qquad(47.9)$$

这式子处处有限，除去在

$$\hbar q_0=\pm q\left(\frac{\partial\varepsilon_t}{\partial t}\right)_{\varepsilon_t=\hbar p_0},$$

在这里，式 (47.9) 具有对数式奇异性．但要注意以下两点．

(a) 对数式奇异性一般是可积分的(例如，把 Γ 代入 $\Pi^{\star}$ 和 $\Sigma^{\star}$ 的骨架图解时)．

(b) 如电子在靠近 Fermi 表面的能量壳层上，则 $\hbar p_0\approx\varepsilon_F$ 而 $\Gamma_S^{(2)}$ 只是当 $|q_0|\approx qv_F$ 时才是奇异的．既然 $c\ll v_F$，这奇异性并不重要，不管对于 $|q_0|=qc$ 的实声子还是对于 $|q_0|\leqslant qc\leqslant\omega_D$ 的虚声子．

这样，方程 (47.7) 在大多数有意义的范围里具有确定意义，我们就有了 Migdal 定理直到 γ^3 级的证明.

注意到方程 (44.15) 的晶格位移 $\mathbf{d}(\mathbf{x})$ 与原子间距 ($\approx q_{TF}^{-1}$) 的无量纲比值按 $(m/M)^{\frac{1}{4}}$ 依赖于离子质量，就可对 Migdal 定理作定性的理解. 对于重离子，$(m/M)^{\frac{1}{4}}$ 这个量是很小的，这显然验证了本章开头的讨论. (事实上，比值 $(m/M)^{\frac{1}{4}}$ 的数值小正是 Born-Oppenheimer 近似为有效的判据.[1]) 在计算图 47.1 那种第二级改正时，比 $(m/M)^{\frac{1}{4}}$ 出现两次，所以 $\Gamma = \gamma\{1 + O[(m/M)^{\frac{1}{2}}]\}$. 按照同一理由，$\Sigma^* = O[(m/M)^{\frac{1}{2}}]$ 也是对的；但如第 36 和 37 节中所看到的，很弱的作用也可以在 Fermi 面附近引起剧烈的效应.

习　　题

12.1　试证，相互作用的电子-声子系统中 $\mu_{ph} = 0$.

12.2　在 Heisenberg 图像中，准确的声子 Green 函数定义为

$$iD(x - x') = \langle \mathbf{O}|T[\hat{\varphi}_H(x)\hat{\varphi}_H(x')]|\mathbf{O}\rangle,$$

这里 $|\mathbf{O}\rangle$ 是耦合的电子-声子系统准确的归一化 Heisenberg 基态. 试由此推导 $iD(q)$ 的 Lehmann 表示式.

12.3　利用 Heisenberg 算符的一般关系 $\partial\hat{O}/\partial t = (i/\hbar) \times [\hat{H}, \hat{O}]$，试证对于方程 (45.16) 所规定的问题，在 $\omega_D \to 0$ 的极限下，Heisenberg 声子场满足下列关系式

$$[\hat{\varphi}_H(x), \hat{\varphi}_H(x')]_{t=t'} = 0,$$

$$\left[\hat{\varphi}_H(x), \frac{\partial\hat{\varphi}_H(x')}{\partial t'}\right]_{t=t'} = \frac{\hbar c^2}{i}\nabla_x^2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

从而推导下列运动方程

---

1) L. I. Schiff，前引书，p. 447.

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\hat{\varphi}_H(x) = -\gamma\nabla_x^2[\hat{\psi}^\dagger_{H\alpha}(x)\hat{\psi}_{H\alpha}(x)].$$

对于有限的 ω_D，这些关系式应怎样修订？

12.4 在 $\omega_D \to \infty$ 的极限下，利用习题 12.3 的结果，试证电子-声子系统的声子 Green 函数满足方程

$$\left(\nabla_x^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)iD(x-x') = \frac{\hbar}{i}\nabla_x^2\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(t-t')$$

$$-\gamma\nabla_x^2\langle\mathbf{O}|T[\hat{\psi}^\dagger_{H\alpha}(x)\hat{\psi}_{H\alpha}(x)\hat{\varphi}_H(x')]|\mathbf{O}\rangle.$$

注意最后的表示式是一般的顶点函数的一个极限．对于有限的 ω_D，相应的结果是什么？

12.5 (a) 计算图 46.6 所示对 $\Sigma^*(q)$ 的最低级贡献．

(b) 计算相应的 $G(p)$ 并就所得的式子讨论单粒子能量和寿命．

(c) 化学势，比热和基态能量受到怎样的影响？

12.6 (a) 计算图 46.6 所示对 $\Pi^*(q)$ 的最低级贡献．

(b) 计算相应的声子传播函数并推导重正化声子频率 Ω_q 和寿命倒数 δ_q 的下列式子(忽略 C/v_F 级的改正)：

$$\Omega_q^2 = \omega_q^2\left[1 - 2N(0)\gamma^2 g\left(\frac{q}{k_F}\right)\right],$$

$$\delta_q = \frac{\pi m\omega_q^2\gamma^2 N(0)}{2\hbar q k_F}\theta(2k_F - q).$$

这里 $g(x)$ 在方程(14.8)中给出，而 $N(0)=mk_F/2\pi^2\hbar^2$ 是在 Fermi 面的一种自旋投影的态密度．注意，在 $q=2k_F$，$\partial\Omega_q/\partial q$ 成为无限大 (Kohn 效应[1])；$2\delta_q/c$ 是纯的正常金属中的超声衰减常数 α_n．

12.7 用 $G(q)$，$D(q)$ 和 $\Gamma(q_1,q_2)$ 写出动量空间中的

---

1) W. Kohn, *Phys. Rev. Letters*, **2**: 393 (1959).

Dyson 方程，算到图 46.6 所示的那一级.

12.8 试证，方程 (46.2) 的能量移动也可写成

$$E - E_0 = \int_0^\gamma \frac{d\gamma'}{\gamma'} \int d^3x \langle \mathbf{O}| \gamma' \hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) |\mathbf{O}\rangle_{\gamma'}$$

$$= -\int_0^\gamma d\gamma' \int d^3x \lim_{z \to x} \lim_{y \to x^+} \langle \mathbf{O}|$$

$$\times T[\hat{\phi}_{H\alpha}(x) \hat{\phi}_{H\alpha}^\dagger(y) \hat{\varphi}_H(z)] |\mathbf{O}\rangle_{\gamma'},$$

这里矩阵元必须就一切 $0 \leqslant \gamma' \leqslant \gamma$ 进行计算. 用 Feynman 图解分析式子的右边，并用 Migdal 定理证明，在正常金属中

$$E - E_0 \underset{(m/M)^{\frac{1}{2}} \to 0}{=} \frac{2}{\hbar} \int_0^\gamma \gamma' d\gamma' \int d^3x \lim_{z \to x} \lim_{y \to x^+}$$

$$\times \int d^4r G^{\gamma'}(x - r) G^{\gamma'}(r - y) D^{\gamma'}(r - z).$$

12.9 叙述有限温度下动量空间中的电子和声子传播函数的 Feynman 规则.

12.10 对于有限温度理论，照 $T = 0$ 理论那样试定义顶点并写出第 46 节所讨论的 Dyson 方程的类比.

12.11 在有限温度理论中，试作出 Migdal 定理的证明到 γ^3 级.

12.12 就有限温度重作习题 12.6.

12.13 讨论电子-声子系统在有限温度下对外界微扰的响应，这微扰按照下式耦合于晶格，

$$H^{\text{ex}} = \int d^3x \tilde{V}^{\text{ex}}(\mathbf{x}, t) \delta\hat{n}(\mathbf{x})$$

$$= \int d^3x V^{\text{ex}}(\mathbf{x}, t) \hat{\varphi}(\mathbf{x}).$$

(比较，例如，习题 5.13.)

第十三章　超 导 电 性

本章研究一个不寻常的现象——超导电性[1]. 虽然基本的实验事实是容易叙述的，建立满意的微观描述却极为困难，早期的理论本质上是唯象的. 但这些理论却是令人惊异地准确并深刻地影响到今天的超导电体的多体理论. 由于这个原因，我们认为详细地讨论唯象理论是重要的，因为它们不仅本身就很重要，而且还可作为对微观处理的引导. 后来的 BCS 理论[2] 代表了多体技巧最成功的应用之一；除了新的预言以外，它还证实了早期的描述是合理的，并得以算出唯象理论中的若干常数.

48. 超导电体的基本性质

我们先扼要讲述最简单的一些实验观测结果. 任何有关超导电性的理论必须至少能说明下列事实.

基本实验事实

1. 导电率为无限大：有很大一类金属元素和合金，冷却

1) 良好的入门参考书有 F. London, "Superfluids," vol.I, Dover Publications, Inc., New York, 1961; D. Shoenberg, "Superconductivity," 2d ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1965; M. Tinkham, "Superconductivity," Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1965.

2) J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, **108**: 1175 (1957).

到离绝对零度只有很少几度时，它就在某个确定的临界温度 T_c 电阻陡然消失[1]. 既然这转变并未伴随着晶格结构及晶格性质的改变，就只能把它解释为一种电子性的转变，即导电电子进入某种有序状态. 作为第一步的近似，假定通常的本构方程（Ohm 定律）

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}. \tag{48.1}$$

这与 Maxwell 方程

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c \operatorname{curl} \mathbf{E} \tag{48.2}$$

结合在一起可得出导电率为无限大的介质中的磁通密度 $\mathbf{B}$ 保持为常数，因为在该材料内 $\mathbf{E}$ 为零. 特定地说，考虑一个超导电体，它在零磁场中冷却到 T_c 以下. 上面的结果表明，即使后来加上磁场，$\mathbf{B}$ 也保持为零(图 48.1).

2. Meissner 效应：虽然导电率为无限大是超导电态最显著的特征，超导电态的真正本性却是在磁性效应中表现得较为清楚. 考虑均匀磁场中的正常金属(图 48.1). 当样品被冷却并成为超导电时，Meissner 和 Ochsenfeld 最先作出的实验[2]表明，磁通全都从内部被逐出. 注意这个结果跟前面关于超导电态中 $\mathbf{B}$ 不变的结论并不矛盾；它只不过是指出这个不变的值必须始终取为零.

3. *临界磁场*：Meissner 效应只是对于足够低的磁场才出现. 为简单计，考虑纯超导电体的一个长柱体处于平行的外加磁场 $\mathbf{H}$ 中，这种情况没有去磁效应. 如果在零磁场中，样品在温度 T 是超导电的，则有唯一的临界磁场 $H_c(T)$，磁场高于它，样品就成为正常的. 这种转变是可逆的，因为只要 H 一

1) H. K. Onnes, *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden, Suppl.*, **34b** (1913).

2) W. Meissner and R. Ochsenfeld, *Naturwiss.*, **21**:787 (1933).

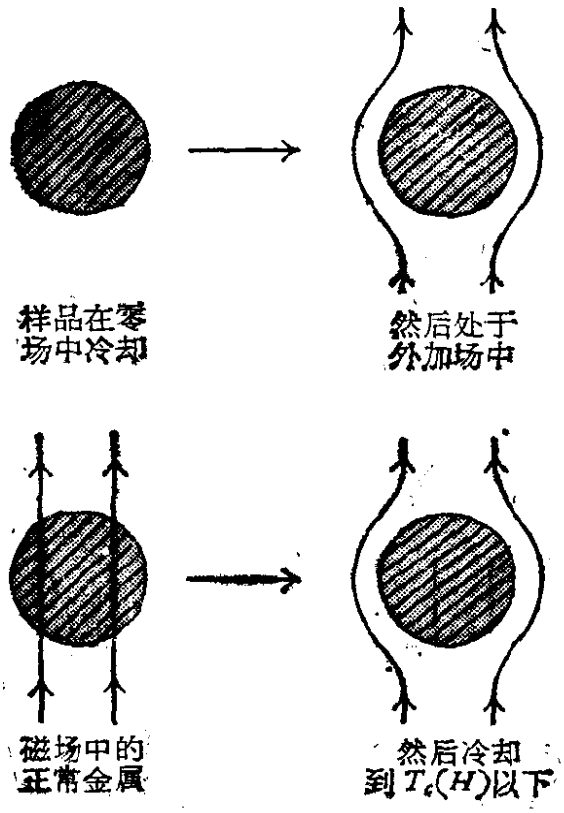


图 48.1　超导电体中的 Meissner 效应.

且降到低于 $H_c(T)$，超导电性就重新出现. 用纯的超导电体作的实验表明[1]，曲线 $H_c(T)$ 大致是抛物线(图 48.2)，

$$H_c(T) = H_c(0)\left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right] \quad \text{(经验公式)}. \qquad (48.3)$$

4. *持久电流和磁通量子化*：作为磁性行为的另一种例子，考虑正常金属环放置在垂直于其平面的磁场中(图 48.3). 当温度降低时，金属成为超导电的并逐出磁通. 然后撤消磁场；磁通不可能穿过超导电金属，总的俘获磁通必须保持为常数，而这是由环本身中流通着的超导电流维持的. 已经观察到

1) 必须说明，许多超导电合金展示一种“混合态”，在这种态中，电阻率保持为零，磁通却穿透样品. 虽然第 50 节将简略地回到这个问题，本章主要限于纯的超导电体，这里 $H_c(0)$ 通常只有几百个奥斯特.

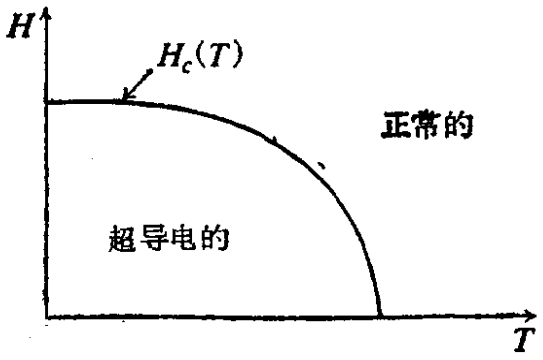


图 48.2 H-T 平面中的相图，显示超导电的和正常的区域以及它们之间的临界曲线 $H_c(T)$ 或 $T_c(H)$.

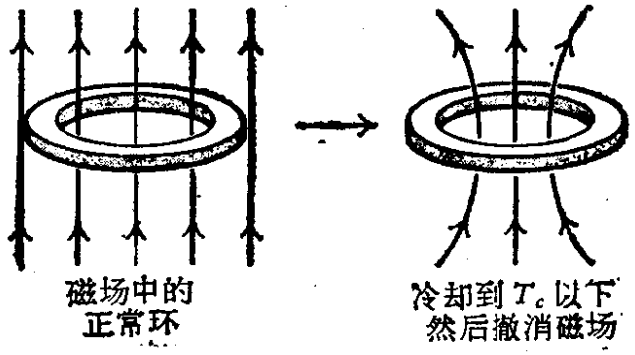


图 48.3 超导电环中的磁通俘获.

这种持久电流延续了很长时间[1]. 此外，在足够厚的环中俘获的磁通是量子化的，其量子单位[2]

$$\varphi_0 = \frac{hc}{2e} = 2.07 \times 10^{-7} \text{ 高斯} \cdot \text{厘米}^2. \qquad (48.4)$$

5. **比热**：除了磁性行为以外，典型的超导电体还具有特殊的热学性质. 对于零外场，转变是二级相变，这就可推得比热是不连续的，但没有潜热[3] (图 48.4). 如第 5 和 29 节所讨

1) 典型的最新测量是 J. File 和 R. G. Mills 作的，*Phys. Rev. Letters*, 10:93 (1963)，他们求得数量级为 10^5 年的寿命.

2) B. S. Deaver, Jr. and W. M. Fairbank, *Phys. Rev. Letters*, 7:43 (1961); R. Doll and M. Naübauer, *Phys. Rev. Letters*, 7:51(1961).

3) W. H. Keesom and J. A. Kok, *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden*. 221e: (1932).

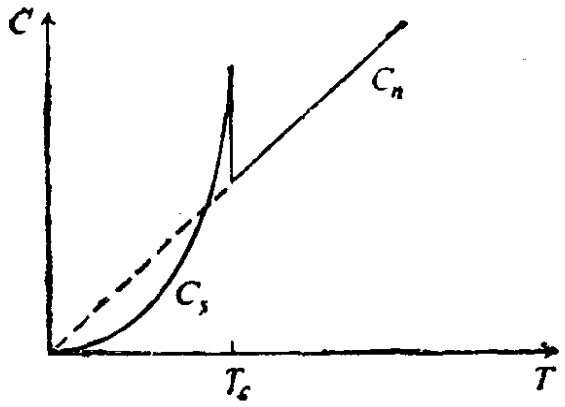


图 48.4　超导电体中比热的图解

论过的，正常态的电子比热 C_n 随温度作线性变化．不过，在超导电态中，比热 C_s 先是在 $T \lesssim T_c$ 处超过 C_n，但然后降到低于 C_n，并随着 $T \to 0$ 而指数式地变为零[1]，

$$C_s \propto \exp \frac{-\Delta_0}{k_B T}. \tag{48.5}$$

这个依赖关系指出能谱中存在间隙，它把激发态从基态隔开一个能量 Δ_0[2]．对于大多数超导电元素，Δ_0 稍为小于 $2k_B T_c$。

6. *同位素效应*：超导电体最后一个特殊性质是同位素效应．我们注意到正常相和超导相的结晶学性质是全同的。但是，关于同位素纯的样品的仔细研究表明，离子格子在超导电性中起很重要作用，因为转变温度典型地按照

$$T_c \propto M^{-\frac{1}{2}} \tag{48.6}$$

随着离子质量变化[3]．这结果指出吸引的电子-声子作用的重

---

1) W. S. Corak, B. B. Goodman, C. S. Satterthwaite and A. Wexler, *Phys. Rev.*, **96**: 1442(1954).

2) 虽然能隙是超导电性的典型特点，但它并不是必要的，具有零直流电阻的"无能隙"超导电体的存在就表明这点．

3) H. Fröhlich, *Phys. Rev.*, **79**:845(1950); E. Maxwell, *Phys. Rev.*, **78**: 477 (1950); C. A. Reynolds, B. Serin, W. H. Wright and L. B. Nesbitt, *Phys. Rev.*, **78**: 487 (1950).

要性，这作用提供了束缚的 Cooper 对偶的形成机理（比较第36，37和46节）.

热力学关系式

为完全起见，先综述一下电动力学的基本方程. 在微观的(原子的)尺度上，只有两个基本的场 $\mathbf{e}$ 和 $\mathbf{b}$，由下列方程所规定

$$\operatorname{div}\mathbf{e} = 4\pi\rho, \tag{48.7a}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{b} = 0, \tag{48.7b}$$

$$\operatorname{curl}\mathbf{e} = -c^{-1}\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t}, \tag{48.7c}$$

$$\operatorname{curl}\mathbf{b} = c^{-1}\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\rho\mathbf{v}. \tag{48.7d}$$

这里 ρ 是总的电荷密度而 $\mathbf{v}$ 是微观的速度场. 宏观的场定义为针对所研究的特定问题的适当大小的体积上的空间平均值

$$\mathbf{E} = \langle \mathbf{e} \rangle_{\text{vol}}, \qquad \mathbf{B} = \langle \mathbf{b} \rangle_{\text{vol}}; \tag{48.8}$$

它们遵守常规的 Maxwell 方程组

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\langle\rho\rangle_{\text{vol}}, \tag{48.9a}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0, \tag{48.9b}$$

$$\operatorname{curl}\mathbf{E} = -c^{-1}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \tag{48.9c}$$

$$\operatorname{curl}\mathbf{B} = c^{-1}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\langle\rho\mathbf{v}\rangle_{\text{vol}}. \tag{48.9d}$$

虽然这些方程在形式上是完全的，但是习惯上要把 $\langle\rho\rangle_{\text{vol}}$ 划分为极化密度 $-\operatorname{div}\mathbf{P}$ 和自由(外界确定的)电荷密度 ρ_f. 方程(48.9a)于是成为

$$\operatorname{div}(\mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}) \equiv \operatorname{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho_f, \tag{48.10}$$

这里 $\mathbf{P}$ 和 $\mathbf{D}$ 分别叫作极化和位移. 用类似的方式，总电流划

分为磁化电流 $c\,\mathrm{curl}\mathbf{M}$，极化电流 $\partial\mathbf{P}/\partial t$ 以及自由(又是外界确定的)电流，后者与自由电荷的运动相联系. 如定义磁场为 $\mathbf{H}\equiv\mathbf{B}-4\pi\mathbf{M}$，则方程 (48.9d) 给出

$$\mathrm{curl}\,\mathbf{H}=\frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_f+\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t}. \tag{48.11}$$

在低频现象中，最后一项一般是可忽略的，我们可以把 $\mathrm{curl}\,\mathbf{H}$ 解释为完全从自由电流而来. 当各个磁学量改变量很小时，对系统所作的功由 $(4\pi)^{-1}\int d^3x\mathbf{H}\cdot d\mathbf{B}$ 给出[1]，所以 Helmholtz 自由能密度的改变成为

$$dF=-sdT+(4\pi)^{-1}\mathbf{H}\cdot d\mathbf{B}, \tag{48.12}$$

相应地有微分关系式

$$s=-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{\mathbf{B}},\qquad \mathbf{H}=4\pi\left(\frac{\partial F}{\partial\mathbf{B}}\right)_T. \tag{48.13}*$$

这里假定了体积保持不变，而 s 是熵密度.

与 Meissner 效应相联系的磁通排出现象指出，在外磁场 $\mathbf{H}$ 中的大块超导电体由条件 $\mathbf{B}=0$ 唯一地表征，不管超导电状态是怎样达到的 (图 48.1). 所以，我们推断超导电体处于真正的热力学平衡，并据此运用宏观热力学的技巧. 但是，对于大多数实验，不可能直接操纵磁通密度 $\mathbf{B}$；然而可以用(例

---

1) 这结果可以很简单地推导出来，只要在自由空间中用面 A 包围系统. Poynting 定理表明，在短时间 dt 中，穿过 A 而流进的能量由 $dW_{em}=-dt(c/4\pi)\int_A d\mathbf{S}\cdot\mathbf{E}\times\mathbf{H}$ 给出. 散度定理和 Maxwell 方程 (48.9c) 与 (48.11) 于是给出

$$dW_{em}=(c/4\pi)\int_v d^3x[c^{-1}\mathbf{H}\cdot d\mathbf{B}+c^{-1}\mathbf{E}\cdot d\mathbf{D}+(4\pi/c)\mathbf{E}\cdot\mathbf{j}_f dt],$$

这验证了上述论断.

* (48.13) 中第二式应理解为:

$$H_x=4\pi\left(\frac{\partial F}{\partial B_x}\right)_T,\quad H_y=4\pi\left(\frac{\partial F}{\partial B_y}\right)_T,\quad H_z=4\pi\left(\frac{\partial F}{\partial B_z}\right)_T.$$

——责任编辑注.

如，螺线管中的）外电流控制着磁场 $\mathbf{H}$，我们不如作一个 Legendre 变换，从 Helmholtz 函数 $F(T,\mathbf{B})$ 转换到新的 Gibbs 自由能密度

$$G(T,\mathbf{H}) = F - (4\pi)^{-1}\mathbf{B}\cdot\mathbf{H}, \tag{48.14}$$

以及相应的微分关系式

$$dG = -sdT - (4\pi)^{-1}\mathbf{B}\cdot d\mathbf{H}, \tag{48.15}$$

$$s = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{\mathbf{H}}, \quad \mathbf{B} = -4\pi\left(\frac{\partial G}{\partial \mathbf{H}}\right)_{T}. \tag{48.16}*$$

考虑长的超导电柱体处于平行磁场中．如在不变的温度下使磁场 $\mathbf{H} = H\hat{z}$ 增加，方程 (48.16) 给出

$$G(T,H) - G(T,0) = -(4\pi)^{-1}\int_0^H B(H')dH'. \tag{48.17}$$

作为一个好的近似，大多数超导电元素的正常态是非磁性的 $(\mathbf{B}=\mathbf{H})$，我们求得

$$G_n(T,H) - G_n(T,0) = -(8\pi)^{-1}H^2. \tag{48.18}$$

作为对比，在超导电体中，$\mathbf{B}$ 为零，这给出

$$G_s(T,H) = G_s(T,0). \tag{48.19}$$

在临界磁场 H_c，两相处于热力学平衡．这条件可表示为方程

$$G_s(T,H_c) = G_n(T,H_c), \tag{48.20}$$

方程 (48.18)—(48.20) 结合在一起，立刻给出

$$G_s(T,0) = G_n(T,0) - (8\pi)^{-1}H_c^2, \tag{48.21}$$

$$F_s(T,0) = F_n(T,0) - (8\pi)^{-1}H_c^2. \tag{48.22}$$

这些方程表明，伴随着超导电态的形成，有负的凝聚能，每单位体积是 $-H_c^2/8\pi$．此外，简单的重新安排导致一般结果

$$G_s(T,H) - G_n(T,H) = (8\pi)^{-1}(H^2 - H_c^2), \tag{48.23}$$

---

* (48.16) 中的第二式应理解为下列三式：

$$B_x = -4\pi\left(\frac{\partial G}{\partial H_x}\right)_T, \quad B_y = -4\pi\left(\frac{\partial G}{\partial H_y}\right)_T, \quad B_z = \left(\frac{\partial G}{\partial H_z}\right)_T$$

——责任编辑注

所以，对于一切 $H < H_c(T)$，超导电相是平衡态.

方程 (48.23) 对温度的导数给出两相的熵差

$$s_s(T,H) - s_n(T,H) = (4\pi)^{-1} H_c(T) \frac{dH_c(T)}{dT}. \quad (48.24)$$

图 48.2 表明右边是负的，所以超导电相的熵低于正常相的熵. 注意方程 (48.24) 与外加场无关，这也可从方程 (48.15) 所导出的 Maxwell 热力学关系式得出. 跟相变联系着的潜热是 $T(s_s - s_n)$，它在 $T = 0$ 和 $T = T_c$ 为零(见图 48.2).

最后，热力学恒等式

$$c_H = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_H \quad (48.25)$$

给出恒定场下的电子比热的差

$$c_{sH} - c_{nH} = \frac{T}{4\pi}\left[\left(\frac{dH_c}{dT}\right)^2 + H_c \frac{d^2H_c}{dT^2}\right]. \quad (48.26)$$

特别是，在 T_c 的比热跃度是

$$(c_s - c_n)_{T_c} = \frac{T_c}{4\pi}\left[\left(\frac{dH_c}{dT}\right)_{T_c}\right]^2, \quad (48.27)$$

这是可测量的量之间的关系式，它相当符合实际.

49. London-Pippard 唯象理论

London 方程[1] 提供了 Meissner 效应的第一个理论描述. 虽然这些方程是描写超导电流 $\mathbf{j}$ 对外加电场和磁场的响应的一对唯象本构关系式，它们也可从下述简单模型推导出来[2].

1) F. London and H. London, *Proc. Roy. Soc.* (*London*), **A 147**: 71 (1935).

2) F. London, 前引书, sec. 8.

London 方程的导出

如果把这些超导电子当作不可压缩无粘滞带电流体，其速度场为 $\mathbf{v}(\mathbf{x}t)$，则超导电流由下式给出

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}t) = -n_s e\mathbf{v}(\mathbf{x}t), \tag{49.1}$$

这里 n_s 是超导电子数密度而 $-e$ 是电子电荷. 连续性方程和牛顿第二定律给出

$$\operatorname{div}\mathbf{j} = \operatorname{div}\mathbf{v} = 0, \tag{49.2}$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{m}\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{h}\right), \tag{49.3}$$

这里 $d\mathbf{v}/dt$ 是全导数(流体动力学导数)而 $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ 是 $\mathbf{b}(\mathbf{x})$ 在微观体积上的细粒平均，这体积的尺度比起原子的尺寸是大的，但比起穿透深度是小的. 在所有以下讨论中，$\mathbf{h}(\mathbf{x})$ 将称为*微观场*[1]. 方程 (49.3) 的左边可用标准的矢量恒等式

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)v \\ &= \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + \nabla\left(\frac{1}{2}v^2\right) - \mathbf{v}\times\operatorname{curl}\mathbf{v}\end{aligned} \tag{49.4}$$

加以改写，我们求得

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + e\frac{\mathbf{E}}{m} + \nabla\left(\frac{1}{2}v^2\right) = \mathbf{v}\times\left(\operatorname{curl}\mathbf{v} - \frac{e\mathbf{h}}{mc}\right). \tag{49.5}$$

这方程的旋度可与 Maxwell 方程(48.9c)相结合，给出

$$\frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial t} = \operatorname{curl}(\mathbf{v}\times\mathbf{Q}), \tag{49.6}$$

这里

---

1) 这里按照 F. London, 前引书, sec. 3, 虽然问题中的场其实是方程(48.8)所定义的 $\mathbf{B}$. 为着明显，平均磁通密度(在整个样品上的粗粒平均)这里称为 $\bar{B}$, 而不按 London 用 B.

$$\mathbf{Q} \equiv \operatorname{curl} \mathbf{v} - \frac{e\mathbf{h}}{mc}. \tag{49.7}$$

考虑零场中的大块超导电体，这时 $\mathbf{Q} = 0$. 于是，从方程 (49.6) 可得出，即使后来加上磁场，$\mathbf{Q}$ 还是保持为零. 既然 Meissner 效应表明磁场中的超导电体处于热力学平衡而不管最终状态是怎样达到的，我们作出基本假定：方程

$$\mathbf{Q} \equiv \operatorname{curl} \mathbf{v} - \frac{e\mathbf{h}}{mc} = 0 \tag{49.8}$$

在一切情况下都正确地描写超导电体. 方程 (49.8) 代入 (49.5) 给出

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla\left(\frac{1}{2} v^2\right) = -\frac{e\mathbf{E}}{m}. \tag{49.9}$$

方程 (49.8) 和 (49.9) 一起组成 London 方程.

半空间和板块的解

为最容易地理解这些唯象方程的含意，可把方程 (49.8) 改写成

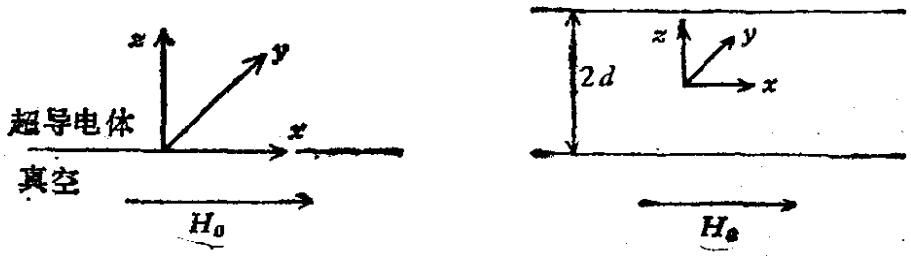
$$\mathbf{h} = -\frac{mc}{n_s e^2} \operatorname{curl} \mathbf{j}. \tag{49.10}$$

对于静态场，取 Maxwell 方程 (48.9d) 的旋度，这与 (49.10) 相结合给出

$$\mathbf{h} = -\frac{mc}{n_s e^2} \operatorname{curl} \mathbf{j} = -\frac{mc^2}{4\pi n_s e^2} \operatorname{curl}\ \operatorname{curl} \mathbf{h}$$

$$= \frac{mc^2}{4\pi n_s e^2} \nabla^2 \mathbf{h}, \tag{49.11}$$

最后一道等式来自方程 (48.9 b). 为确定起见，研究半无限的超导电体 ($z > 0$) 处于平行表面的外场 $\mathbf{H}_0 = H_0 \hat{x}$ 中 (图 49.1 a)，内部的微观场 $\mathbf{h}(z) = h(z)\hat{x}$ 满足方程(49.11)，其可



(a) (b)

图 49.1 平行外场中的超导电 (a) 半空间 (b) 板块的几何关系.

接受的解是

$$h(z) = H_0 e^{-z/\lambda_L}, \tag{49.12}$$

这里

$$\lambda_L = \left(\frac{mc^2}{4\pi n_s e^2}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{49.13}$$

叫作 London 穿透深度. 这样，磁场被限制在厚度$\approx \lambda_L$的表面层中，而对于 $z \gg \lambda_L$ 则指数式地变为零. 如果n_s取作总的电子密度，则λ_L的典型值为几百埃（见表 49.1）. [1]实验指出，穿

表 49.1 超导电体的特征长度

	$\lambda_L(0)$，埃[1]	ξ_0，埃	$\lambda_L(0)/\xi_0$	$\lambda(0)_{理论}$，埃[2]	$\lambda(0)_{实验}$，埃
Al	160	16,000	0.010	530	490,515
Sn	340	2,300	0.16	510	510
Pb	370	830	0.45	440	390

1) $\lambda_L(0)$ 是假定了在 $T = 0K$ 时 $n_s = n$ 而算出的.

2) $\lambda(0)_{th}$ 是零温度下的穿透深度，用 BCS 理论就电子在边界上漫散射而算出.

来源: R. Mecervey and B. B. Schwartz, Equilibrium Properties: Comparison of Experimental Results with Predictions of BCS Theory, in R. D. Parks (ed.), "Superconductivity," vol. I, p. 174, Marcel Dekker, Inc., New York, 1969.

1) 这个尺度很小，要精密测量十分困难；关于典型的实验步骤的讨论见 F. London, 前引书, sec. 5.

透深度随温度的上升而增大，函数

$$\frac{\lambda_L(T)}{\lambda_L(0)} = \left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^4\right]^{-\frac{1}{2}} \text{(经验公式)}, \qquad (49.14)$$

在 $T/T_c \gtrsim \frac{1}{2}$ 与实验数据拟合得很好[1]. 既然 n_s 是方程 (49.13) 中唯一可变的量，我们推论

$$\frac{n_s(T)}{n_s(0)} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^4 \quad \text{(经验公式)}. \qquad (49.15)$$

作为第二个例子，考虑厚度为 $2d$ 的板块处于平行其表面的外场 $H_0\hat{x}$ 中(图 49.1b). 如把坐标原点置于板块的中点，则方程 (49.11) 的适当的解是

$$h(z) = H_0 \frac{\cosh(z/\lambda_L)}{\cosh(d/\lambda_L)}. \qquad (49.16)$$

平均磁通密度 $\bar{B}$ 是微观场的空间平均，

$$\bar{B} = \frac{1}{2d}\int_{-d}^{d} dz h(z) = \frac{H_0\lambda_L}{d}\tanh\frac{d}{\lambda_L}. \qquad (49.17)$$

在厚板块的极限下，方程 (49.17) 成为

$$\bar{B} \approx \frac{H_0\lambda_L}{d} \quad (d \gg \lambda_L), \qquad (49.18)$$

而样品展示 Meissner 效应；在相反的极限下，平均磁通密度实质上即是 H_0.

准磁通（fluxoid）的守恒和量子化

London 方程隐含着令人惊异的守恒定律. 为简单计，只研究线性化了的方程

$$-\frac{e\mathbf{E}}{m} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{e}{m n_s}\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} \qquad (49.19)$$

1) 关于实验跟方程 (49.14) 以及 BCS 理论的理论预测的比较，参看例如 A. L. Shawlow and G. E. Devlin, *Phys. Rev.*, **113**: 120 (1959).

与方程(49.8)，不过，较为一般的处理也是可以作出的(习题13.1). 考虑面 S，它以固定的闭合曲线 C 为边界，C 完全处于超导电材料中(图 49.2). 不管 S 是否也完全在超导电体中(图 49.2 a 或 b)，我们可以把 Maxwell 方程 (48.9 c) 积分，从而得出

$$\int d\mathbf{S}\cdot\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t}=-c\int d\mathbf{S}\cdot \operatorname{curl}\mathbf{E}$$

$$=-c\oint_C d\mathbf{l}\cdot\mathbf{E}, \qquad (49.20)$$

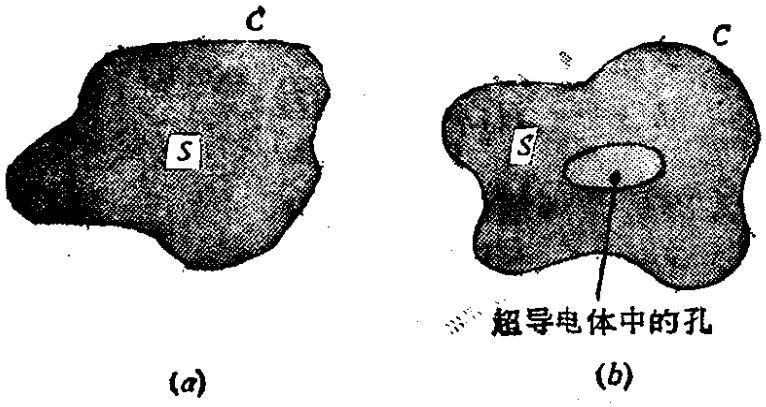


图 49.2 计算准磁通所用的积分迴路:
(a) 单连通的; (b) 复连通的.

右边已用 Stokes 定理作了变换. 既然 C 在超导电体内，方程 (49.19) 在每一点都适用，这给出

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\int d\mathbf{S}\cdot\mathbf{h}+\frac{mc}{n_s e^2}\oint_C d\mathbf{l}\cdot\mathbf{j}\right)=0. \qquad (49.21)$$

我们看到，按

$$\Phi\equiv\int d\mathbf{S}\cdot\mathbf{h}+\frac{mc}{n_s e^2}\oint_C d\mathbf{l}\cdot\mathbf{j} \qquad (49.22)$$

定义的*准磁通*[1] 在一切时刻保持为常数. 很清楚，Φ 不同于

1) F. London, 前引书, sec.6.

磁通，相差的是感生超电流的附加贡献.

附加一些假定，可以导出更为特定的结果.

(1) 如 C 足够地远离边界，则 $\mathbf{j}$ 指数式地小，而 Φ 即化为磁通.

(2) 如 C 的内部完全是超导电的 (图 49.2a)，则由另一 London 方程 (49.8) 立刻推出，Φ 为零.

(3) 作为前一结论的推论，对于一切路径 C'，只要 C' 可以保持在超导电体中而连续变形为 C，Φ 都是一样的.

F. London 又注意到，方程 (49.8) 可用矢量势 $\mathbf{A}$ 写成

$$\operatorname{curl}\left(m\mathbf{v}-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)=0, \tag{49.23}$$

这里

$$\mathbf{h}=\operatorname{curl}\mathbf{A}. \tag{49.24}$$

正则动量由下式给出

$$\mathbf{p}=m\mathbf{v}-\frac{e\mathbf{A}}{c}, \tag{49.25}$$

而方程 (49.23) 于是成为

$$\operatorname{curl}\mathbf{p}=0, \tag{49.26}$$

这可以当作推广的无旋流动条件. 此外，准磁通可写成

$$\Phi=-\frac{c}{e}\oint_C d\mathbf{l}\cdot\mathbf{p}. \tag{49.27}$$

这方程使人想起 Bohr-Sommerfeld 量子化关系式，而且 London 确实提出了准磁通量子化，其量子单位为 hc/e[1]. 如第 48 节所注意到的，这个预测后来证实了，但观测到的量子单位是 $hc/2e$ [方程 (48.4)].

---

1) F. London, 前引书, p. 152.

Pippard 的推广方程

现在，为矢量势选取一个特定的规范（London 规范）是方便的，

$$\mathrm{div}\,\mathbf{A} = 0, \tag{49.28 a}$$

$$\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{n}} = 0 \quad (\text{在边界上}), \tag{49.28 b}$$

这使我们可以把静态的 London 方程 (49.10) 改写如

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{n_s e^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{x}). \tag{49.29}$$

这一规范选择总是可能的，因为只要加上 Laplace 方程的一个适当的解的梯度总可使方程 (49.28 b) 得以满足. 注意 London 规范保证 $\mathrm{div}\mathbf{j} = 0$ 以及边界上 $\mathbf{j}\cdot\hat{\mathbf{n}} = 0$. 方程 (49.29) 表明，London 理论假定 $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ 正比于同一点的 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$. 此外，理论预测穿透深度只依赖于基本常数和 n_s [方程 (49.13)]. 为检验这些预测，Pippard 研究了超导电的锡铟合金的性质[1]. 虽然像 $H_c(T)$ 和 T_c 之类的热力学性质并不因为杂质铟的浓度相当大（$\lesssim 3\%$）而有所改变，他发现穿透深度增大了差不多一个因子 2. 这种行为在 London 图像中是不可理解的，因为穿透深度的增大意味着 n_s 值的降低以及自由能和其他热力学性质的相应变化. 根据这个理由以及其他理由，Pippard 提出方程 (49.29) 的非定域推广，$\mathbf{j}(\mathbf{x})$ 决定于 $\mathbf{A}$ 在尺度为 r_0 的某一邻域上的空间平均值. 对于重掺杂合金，r_0 可与正常金属中的电子自由程相比；但对于纯金属，r_0 不是无限大而是趋于一个特征长度 ξ_0，叫作 Pippard（或 BCS）相干长度. Pippard 于是作出特定的选择

---

1) A. B. Pippard, *Proc. Roy. Soc.* (*London*), **A216**: 547 (1953).

$$\frac{1}{r_0}=\frac{1}{\xi_0}+\frac{1}{l}, \tag{49.30}$$

并假定

$$\mathbf{j}(\mathbf{x})=-\frac{n_s e^2}{mc}\frac{3}{4\pi\xi_0}\int d^3x'\,\frac{\mathbf{X}[\mathbf{X}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}')]}{X^4}\,e^{-X/r_0}, \tag{49.31}$$

这里 $\mathbf{X}=\mathbf{x}-\mathbf{x}'$. 对测量所得的穿透深度进行拟合，给出[1]

$$\xi_0\simeq 0.15\,\frac{\hbar v_F}{k_B T_c}. \tag{49.32}$$

作为比较，关于纯样品的 BCS 理论导致十分相似的非定域关系式，并指出 ξ_0 为

$$\xi_0=0.180\,\frac{\hbar v_F}{k_B T_c}=\frac{\hbar v_F}{\pi\Delta_0}, \tag{49.33}$$

这里 Δ_0 是零温度下的能隙. ξ_0 的典型数值示于表 49.1.

Pippard 方程把感生超导电流 $\mathbf{j}$ 联系于总矢量势 $\mathbf{A}$. 但存在外加磁场时，$\mathbf{A}$ 包含外加电流以及 $\mathbf{j}$ 本身的贡献，因而需要把方程(49.31)和决定总磁场的 Maxwell 方程联立起来求解. 不过，注意到存在两种特征长度，有可能提取出重要的物理特点. 矢量势随着自洽的且依赖于温度的穿透深度 λ 而变，这 λ 并不一定与 London 穿透深度 λ_L [定义于方程 (49.13)] 一样，至于积分核具有与温度无关的 r_0，它差不多就是 ξ_0 和 l 中较小的一个. 如 $r_0\ll l$，则矢量势变化缓慢，可用它在 $\mathbf{x}'=\mathbf{x}$ 的值来计算. 按这方式，我们得到

$$\begin{aligned} j_k(\mathbf{x}) &\approx -\frac{n_s e^2}{mc\xi_0}A_l(\mathbf{x})\frac{3}{4\pi}\int d^3X X_k X_l\frac{e^{-X/r_0}}{X^4} \\ &= -\frac{n_s e^2}{mc\xi_0}A_l(\mathbf{x})\delta_{kl}\int_0^\infty dX e^{-X/r_0}, \end{aligned}$$

1) T. E. Faber and A. B. Pippard, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A231**: 336 (1955).

或

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{n_s e^2 l}{mc(l+\xi_0)}\mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (r_0 \ll \lambda). \quad (49.34)$$

凡是满足这个定域条件 ($r_0 \ll \lambda$) 的样品，叫作 London 超导电体，因为方程 (49.31) 这时重现 London 方程 (49.29) 的形式，但系数变小一个因子 $(1+\xi_0/l)^{-1}$. 与方程 (49.10) 和 (49.11) 的比较立刻给出相应的零温度穿透深度

$$\lambda(0) = \lambda_L(0)\left(\frac{l+\xi_0}{l}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ (定域极限: } r_0 \ll \lambda). \quad (49.35)$$

对于纯的 London 超导电体 ($\xi_0 \ll l$)，方程 (49.35) 归结为前面的 London 表示式.

实际上 (见表 49.1)，大多数超导电元素在低温下违背纯 London 超导电体的条件 $r_0 \approx \xi_0 \ll \lambda$. 因此，London 超导电体通常是重掺杂合金，r_0 决定于 l 而不是决定于 ξ_0，下列不等式成立: $r_0 \approx l \ll \lambda$. 在这情况下，方程 (49.35) 可解释脏合金中观测到的穿透深度要增加，在脏合金中 $l \ll \xi_0$. 如样品在低温下是 London 超导电体，方程 (49.14) 表明，它在一切 $T < T_c$ 保持为 London 超导电体. 但是，既然随着 $T \to T_c$，任一超导电材料的穿透深度迅速增大，一切超导电体在足够靠近 T_c 时都成为 London 超导电体.

重要的是，方程 (49.34) 和 (49.35) 只对 $r_0 \ll \lambda$ 才正确，现在考虑较为典型的非定域极限 ($r_0 \gg \lambda$)，这种材料叫作 Pippard 超导电体. 虽然一般解是很困难的，但对于包围着 xy 平面中电流薄层的无限超导电体，可以完全地算出 $\mathbf{j}$ 和 $\mathbf{h}$. 电流薄层是磁场源，而磁场则又感生出超导电流 $\mathbf{j}(\mathbf{x})$. 总电流是这两种贡献的和，而 Maxwell 方程 (48.9 d) 成为

$$\operatorname{curl}\mathbf{h} = \operatorname{curl}\ \operatorname{curl}\mathbf{A} = 4\pi c^{-1}[j_0\hat{y}\delta(z) + \mathbf{j}(\mathbf{x})]. \quad (49.36)$$

这个方程必须与 Pippard 方程一同解出，后者提供了 $\mathbf{j}$ 和 $\mathbf{A}$ 之

间的另一关系式.

由于平移不变性，引入三维 Fourier 变换

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3}\int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\mathbf{j}(\mathbf{q}), \qquad (49.37\ a)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3}\int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\mathbf{A}(q), \qquad (49.37\ b)$$

是有益的，而由 London 规范就可得出

$$\mathbf{q}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q}) = 0. \qquad (49.38)$$

可以直截了当地验证，方程 (49.31) 的 Fourier 变换式取如下

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}) = -\frac{c}{4\pi}K(q)\mathbf{A}(\mathbf{q}), \qquad (49.39)$$

这里

$$K(q) = -\frac{3n_s e^2}{mc^2\xi_0}4\pi\int_0^\infty \frac{dx}{x^2}e^{-x/r_0}\frac{1}{q}\frac{\partial}{\partial q}\frac{\sin qx}{qx}$$

$$= \frac{6\pi n_s e^2}{mc^2\xi_0 q}\left\{\frac{\arctan qr_0}{(qr_0)^2}[1+(qr_0)^2]-\frac{1}{qr_0}\right\}, \qquad (49.40)$$

其中已用规范条件 (49.38) 简化了各矢量的分量. 此外，方程 (49.36) 的 Fourier 变换式由下式给出

$$-\mathbf{q}\times[\mathbf{q}\times\mathbf{A}(\mathbf{q})] = 4\pi c^{-1}\int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}[j_0\hat{y}\delta(z)+\mathbf{j}(\mathbf{x})]$$

$$= 4\pi c^{-1}[(2\pi)^2 j_0\hat{y}\delta(q_x)\delta(q_y)+\mathbf{j}(\mathbf{q})], \qquad (49.41)$$

左边可用方程 (49.38) 加以简化:

$$-\mathbf{q}\times[\mathbf{q}\times\mathbf{A}(\mathbf{q})] = q^2\mathbf{A}(\mathbf{q})-\mathbf{q}[\mathbf{q}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q})] = q^2\mathbf{A}(\mathbf{q}).$$

如利用方程 (49.39) 把 $\mathbf{j}(\mathbf{q})$ 用 $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ 表出，所得的代数方程容易解出，它给出

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{c}\frac{(2\pi)^2 j_0\hat{y}\delta(q_x)\delta(q_y)}{q^2+K(q)}. \qquad (49.42)$$

相应的空间量成为

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) \equiv A(z)\hat{\mathbf{y}} = \frac{4\pi}{c}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi}\frac{j_0\hat{\mathbf{y}}e^{iqz}}{q^2 + K(q)}, \qquad (49.43\,a)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) \equiv h(z)\hat{\mathbf{x}} = -\frac{4\pi}{c}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi}\frac{j_0\hat{\mathbf{x}}iqe^{iqz}}{q^2 + K(q)}, \qquad (49.43\,b)$$

这提供了完全解.

有意义的是，检查 $z \to \infty$ 时的 $h(z)$ 的渐近形式. 如 $q^2 + K(q)$ 在实的 q 轴上没有零点，则积分路径可变形到上半 q 平面中去，这表明，$h(z)$ 比 z 的任一代数函数更快地变为零. 既然这行为正是 Meissner 效应中所见到的，我们得到一般的判据

$$q^2 + K(q) \neq 0 \quad (\text{对于实的 } q)\text{: Meissner 效应} \qquad (49.44)$$

实际上，方程 (49.44) 并不很方便，因为 $K(q)$ 是 q 的复杂函数，我们必须改为依靠图解方法. Pippard 积分核 [方程 (49.40)] 描画于图 49.3. 它有两个特征性的特点：对于一切 q，$K(q)$ 是正的；$K(q)$ 单调下降. 对于具有第一个性质的任一核，可把方程 (49.44) 简化为形式

$$\begin{aligned} &K(0) \neq 0 \quad \text{Meissner 效应}, \\ &K(0) = 0 \quad \text{无Meissner 效应}, \end{aligned} \qquad (49.45)$$

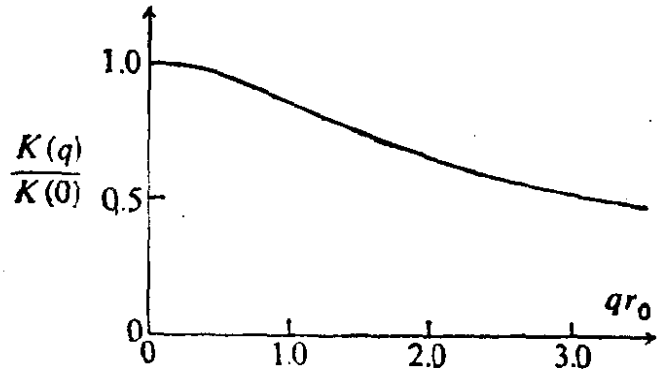


图 49.3 Pippard 积分核 $K(q)$ [方程(49.40)].

这是有用而简单的判据[1].

上面的讨论只考虑 $h(z)$ 的渐近行为，这一般不同于纯指数式. 因此，必须推广穿透深度的概念，一个自然的选择是[2]

$$\lambda = \int_0^\infty dz \frac{h(z)}{h(z=0)} = \frac{A(z=0)}{h(z=0)}.$$

方程 (49.43b) 的积分只对 $|z| \neq 0$ 收敛，而 $h(z=0)$ 必须用其他方法决定. 但这并不成为问题，因为从 Ampère 定律可得

$$h(z=0) = 2\pi c^{-1} j_0,$$

于是求得

$$\lambda = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty dq \frac{1}{q^2 + K(q)}. \tag{49.46}$$

Pippard 积分核[方程 (49.40)] 的形式相当复杂，从而不可能就一切 l 和 ξ_0 对 λ 进行解析的计算. 但是，我们注意到，重要的 q 的数值为 λ^{-1} 的数量级. 在定域极限 ($\lambda \gg r_0$)，图 49.3 表明可用 $K(0)$ 来近似 $K(q)$，简单的积分就给出前面的式子 (49.35). 在相反的(非定域)极限，$K(q)$ 可用它在 $q \to \infty$ 时的渐近形式

$$K(q) \sim \frac{3\pi^2 n_s e^2}{mc^2 q \xi_0} \quad (q \to \infty) \tag{49.47}$$

来近似，于是，直截了当的计算给出零温度的结果[3]

---

1) M. R. Schafroth, *Helv. Phys. Acta.*, **24**:645 (1951).

2) A. B. Pippard, 前引文.

3) 一个等价的步骤是，把方程 (49.46) 改写成无量纲形式

$$1 = 2\pi^{-1}\int_0^\infty dt[t^2 + (\lambda^3/\lambda_L^2 \xi_0) t^{-1} F(tr_0/\lambda)]^{-1},$$

这里 $F(x) = \frac{3}{2}[(x^{-2}+1)\arctan x - x^{-1}]$. 在 $r_0/\lambda \to 0$ 时和在 $r_0/\lambda \to \infty$ 时，$F(tr_0/\lambda)$ 的极限值分别重现方程 (49.35) 和 (49.48).

$$\lambda(0)=\frac{8}{9}\left(\frac{\sqrt{3}}{2\pi}\right)^{\frac{1}{3}}[\lambda_L(0)^2\xi_0]^{\frac{1}{3}}$$

(非定域极限：$\lambda \ll r_0$). (49.48)

这式子与平均自由程 l 无关，因为方程(49.31)的空间积分受限制于穿透深度 λ 而不是 r_0. 方程(49.35)和(49.48)构成 Pippard 理论的中心结果. 不仅可以解释合金中穿透深度的增加，并且澄清了纯 Pippard 材料测出的穿透深度与 London 数值(见表 49.1)相差因子≈2—3 的分歧，这是因为

$$\frac{\lambda(0)}{\lambda_L(0)}=\frac{8}{9}\left[\frac{\sqrt{3}\,\xi_0}{2\pi\lambda_L(0)}\right]^{\frac{1}{3}}. \qquad (49.49)$$

显然原来的 Pippard 理论并不确定 $\lambda(T)$ 对温度的依赖关系，通常就认定方程(49.14)的经验定律，不管是对于定域还是非定域极限.

50. Ginzburg-Landau 唯象理论

London 理论的本来形式有一个严重缺陷，这是因为它明显地预言：在 $H<H_c$ 的场中，Meissner 态将分解为正常薄层和超导电薄层相交替的态，每层厚度 $d_n \ll d_s$[1]. 这结果是容易验证的：如果 $d_n \ll d_s$，则凝聚能密度实质上保持为 $-H_c^2/8\pi$ 不变，而如果 $d_s \ll \lambda$，则因为磁场穿透，Gibbs 自由能密度会降低 $-H^2/8\pi$. F. London 注意到，这种论述忽视了正的表面能的可能性，这表面能与正常-超导电分界面有关，他还利用已经观测到 Meissner 态是稳定的这一性质，估计这种表面能的贡献. 作为对这一缺陷的较为根本的补救，

1) F. London, 前引书, pp. 125—130.

Ginzburg 和 Landau[1] 提出超导电体的另一种唯像描述，它以自然的方式解释表面能.

自由能的展开式

在 T_c 有相变，这表明出现了一种有序态，电子部分地凝聚为无摩擦超流体. Ginzburg 和 Landau 用复数有序参数 $\Psi(\mathbf{x})$ 描写凝聚态. 从观察到有二级相变可得出，在 $T \geqslant T_c$ 时，Ψ 为零，而且 Ψ 的大小随着 $T_c - T \geqslant 0$ 的增大而增大. 在靠近 T_c 时，量 $|\Psi|$ 是很小的，同时我们假定零磁场中超导电态的微观自由能密度 F_{s0} 的展开式如下，

$$F_{s0} = F_{n0} + a|\Psi|^2 + \frac{1}{2} b|\Psi|^4 + \cdots,$$

这里 F_{n0} 是零磁场中正常态的自由能密度，而 a 和 b 是依赖于温度的实数唯象常数. 既然有序参数在无外场时是均匀的，Ginzburg 和 Landau 加上一个正比于 $|\nabla\Psi|^2$ 的项，这项倾向于抑制 Ψ 的空间变化. 与 Schrödinger 方程类比，这一项写为

$$(2m^*)^{-1}|-i\hbar\nabla\Psi|^2;$$

这里 m^* 是有效质量. 有磁场时，这项假定为取规范不变形式

$$(2m^*)^{-1}\left|\left(-i\hbar\nabla + \frac{e^*\mathbf{A}}{c}\right)\Psi\right|^2,$$

这里 $-e^*$ 是电子电荷的某个整倍数，而

$$\operatorname{curl}\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{h}(\mathbf{x}) \qquad (50.1)$$

决定微观磁场. 按这方式，磁场中超导电态的总自由能密度成为

---

1) V. L. Ginzburg and L. D. Landau: *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**:1064 (1950). 英文译文见于 "Men of Physics: L. D. Landau," vol. I, p. 138, Pergamon Press, Oxford, 1965.

$$F_s = F_{n0} + a|\Psi|^2 + \frac{1}{2}b|\Psi|^4$$

$$+ (2m^*)^{-1}\left|\left(-i\hbar\nabla + \frac{e^*\mathbf{A}}{c}\right)\Psi\right|^2 + \frac{h^2}{8\pi}, \qquad (50.2)$$

最后一项是磁场的能量密度. 按常规,选择 Ψ 的特定归一化:

$$|\Psi|^2 = n_s^*, \qquad (50.3)$$

这里 n_s^* 提出了一种有效的超导电子密度的定义. 这个选择确定了比值 $(a/b)^2$. 实验[1] 指出

$$e^* = 2e, \quad m^* = 2m, \qquad (50.4)$$

跟第 36 和 37 节的配对假说相符合; 所以,我们指认 n_s^* 为配对电子的密度,并用下式定义 n_s,

$$n_s^* = \frac{1}{2}n_s. \qquad (50.5)$$

把方程 (50.2) 遍及样品全部体积进行积分,得到样品的自由能. 但在均匀外场 $\mathbf{H}$ 中,恰当的热力学势是 Gibbs 自由能 (比较第 48 节),必须考虑

$$\int d^3x\,[F_s - (4\pi)^{-1}\mathbf{h}\cdot\mathbf{H}] = \int d^3x G_s, \qquad (50.6)$$

这里 G_s 是微观 Gibbs 自由能密度. 热力学稳定性条件要求: 在方程(50.1)的限制下,对于有序参数和矢量势的任意变分,方程(50.6)取极值. 直截了当的变分计算给出下列场方程式

$$(2m^*)^{-1}\left(-i\hbar\nabla + \frac{e^*\mathbf{A}}{c}\right)^2\Psi + a\Psi + b|\Psi|^2\Psi = 0, \qquad (50.7a)$$

$$\frac{c}{4\pi}\operatorname{curl}\mathbf{h} = -\frac{e^*\hbar}{2m^*i}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*)$$

$$- \frac{(e^*)^2}{m^*c}|\Psi|^2\mathbf{A}; \qquad (50.7b)$$

1) B. S. Deaver, Jr. and W. M. Fairbank, 前引文; R. Doll. and M. Näbauer, 前引文; J. E. Zimmerman and J. E. Mercereau, *Phys. Rev. Letters*, **14**: 887(1965).

如果$\mathbf{A}$和Ψ满足下列边界条件，则剩下的面积分为零，

$$\hat{n}\cdot\left(-i\hbar\nabla+\frac{e^*\mathbf{A}}{c}\right)\Psi=0, \tag{50.8 a}$$

$$\hat{n}\times(\mathbf{h}-\mathbf{H})=0. \tag{50.8 b}$$

方程(50.7)表明，Ψ遵守非线性的“Schrödinger”方程，而磁场决定于超电流

$$\mathbf{j}=-\frac{e^*\hbar}{2m^*i}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)-\frac{(e^*)^2}{m^*c}|\Psi|^2\mathbf{A}. \tag{50.9}$$

但是，Ψ的边界条件十分不同于通常的 Schrödinger 理论，而可理解为保证$\mathbf{j}\cdot\hat{\mathbf{n}}$在样品的表面上为零．方程(50.8b)意味着磁场的切向分量在表面的两方连续．

简单情况下的解

虽然不能得到这组耦合方程的完全解，但研究极限情况可以发现定性的特点．无磁场($\mathbf{A}=0$)时，方程(50.7a)具有空间均匀解

$$\Psi=0 \quad 或 \quad |\Psi|^2=-\frac{a}{b}. \tag{50.10}$$

第一个解明显地代表正常态，因为这时F_s等于F_{n0}．只有当a/b为负时，第二个解才是物理上可接受的；它代表超导电态，相应的自由能密度

$$F_{s0}=F_{n0}-\frac{1}{2}\frac{a^2}{b} \quad (零场) \tag{50.11}$$

与方程(48.22)比较给出

$$\frac{a^2}{b}=\frac{H_c(T)^2}{4\pi}. \tag{50.12}$$

方程(50.12)表明b必须是正的，这又保证了F_s是下有界的[见方程(50.2)]．按照 Ginzburg 和 Landau 的作法，假定b

与温度无关，而

$$a(T) = (T - T_c)a' \tag{50.13}$$

在 $T < T_c$ 时是负的，并在 T_c 线性地趋于零．这一选择正确地拟合于 $H_c(T)$ 在靠近 T_c 的线性斜率，而且也预测出 $n_s^*(T) \propto (T_c - T)$ [比较方程 (49.15)]．

作为第二个简单情况，考虑一维的几何关系，Ψ 变化，但 **h** 为零：

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\Psi}{dz^2} + a\Psi + b|\Psi|^2\Psi = 0. \tag{50.14}$$

假定 Ψ 是实的，并引入无量纲有序参数

$$f(z) = \frac{\Psi(z)}{|\Psi_\infty|}, \tag{50.15}$$

这里

$$|\Psi_\infty| = \left(\frac{|a|}{b}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{50.16}$$

是样品深处的 Ψ 的大小．方程 (50.14) 和 (50.15) 联立给出

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*|a|}\frac{d^2f}{dz^2} - f + f^3 = 0, \tag{50.17}$$

这定义了有序参数在空间中变化的自然的长度标尺

$$\xi(T) \equiv \left[\frac{\hbar^2}{2m^*|a(T)|}\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar}{[2m^*(T_c - T)a']^{\frac{1}{2}}}. \tag{50.18}$$

这长度叫作 (Ginzburg-Landau) 相干长度．当 $T \to T_c$，它变成很大，从而十分不同于第 49 节所引入的温度无关参数 ξ_0 或 r_0．

在某些物理情况中(见图 50.1 a)，Ψ 实质上在超导电区的边界上 ($z = 0$) 为零．方程 (50.17) 则可用以研究 $|f|$ 怎样趋近于它在∞的渐近值 1．直接的第一次积分由下式给出

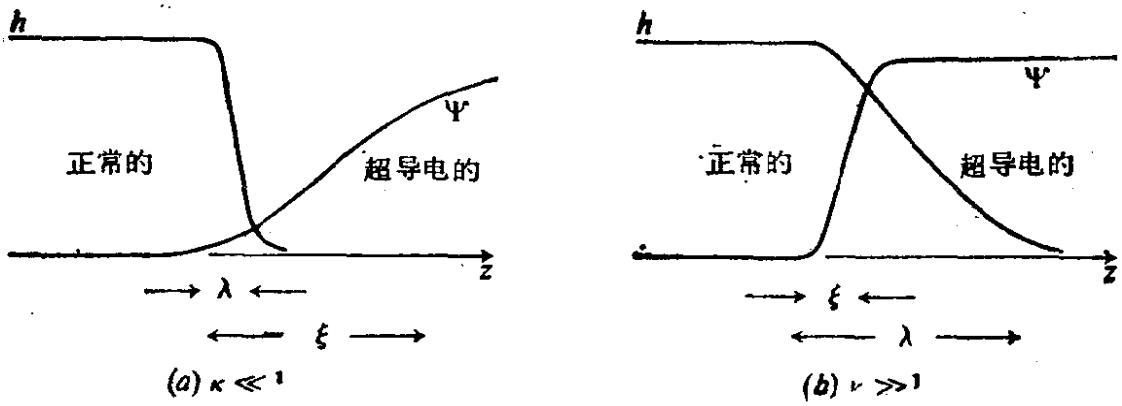


图 50.1 正常的和超导电的材料之间的表面区域
(a) $\lambda \ll \xi(\kappa \ll 1)$ 和 (b) $\lambda \gg \xi(\kappa \gg 1)$.

$$\xi^2\left(\frac{df}{dz}\right)^2 = \frac{1}{2}(1-f^2)^2, \tag{50.19}$$

这里常数数值是这样选择的，它保证当 $f^2 \to 1$ 时 $f' \to 0$. 如 f 随 z 的增大而增大，我们必须取正的平方根

$$\frac{df}{dz} = \frac{1-f^2}{\sqrt{2}\,\xi},$$

这容易积分而给出

$$f(z) = \tanh\frac{z}{\sqrt{2}\,\xi}. \tag{50.20}$$

正像电磁穿透那样，f 的空间变化限于 $|z| \approx \xi$ 的区域，因为 $1-|f|$ 对于 $|z| \gg \xi$ 是指数式趋于零的.

作为最后一个例子，考虑外加磁场以及实质上均匀的有序参数 $\Psi = |\Psi_\infty|$(见图 50.1 b). 超导电流[方程 (50.9)]于是归结为

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{(e^*)^2 n_s^*}{m^* c}\mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\frac{e^2 n_s}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{x}), \tag{50.21}$$

它丝毫不差地具有 London 方程(49.29)的形式. 由此立刻得到磁场穿透深度为

$$\lambda(T) = \left|\frac{m^* c^2}{4\pi n_s^*(T)(e^*)^2}\right|^{\frac{1}{2}}, \tag{50.22}$$

或

$$\lambda(T)=\left[\frac{m^*c^2b}{4\pi(e^*)^2(T_c-T)a'}\right]^{\frac{1}{2}},$$

对于 $T\to T_c$，它正比于 $(T_c-T)^{-\frac{1}{2}}$ [比较方程 (49.14)].

重要的是，相干长度 $\xi(T)$ 和穿透深度 $\lambda(T)$ 都是用常数 a 和 b 定义的唯象常数. 按常规引入 Ginzburg-Landau 参数

$$\kappa\equiv\frac{\lambda(T)}{\xi(T)}, \tag{50.23}$$

它在靠近 T_c 时是与温度无关的. 用以上定义，简单的计算给出

$$\kappa=\frac{\sqrt{2}\,e^*}{\hbar c}H_c(T)\lambda(T)^2\quad(T\approx T_c), \tag{50.24 a}$$

$$\kappa=\frac{m^*c}{\hbar e^*}\left(\frac{b}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{50.24 b}$$

在许多应用中这两式都是有用的. 具体讲，方程 (50.24 a) 把 κ 跟可测量的量 H_c 和 λ 联系起来；它也可改写如

$$H_c=\frac{\varphi_0}{2\pi\sqrt{2}\,\xi\lambda}, \tag{50.25}$$

这里(如下面的讨论所表明)

$$\varphi_0=\frac{hc}{e^*} \tag{50.26}$$

是磁通量子.

磁通量子化

超电流的 Ginzburg-Landau 表示式 [方程 (50.9)]，可用以验证 London 关于超导电体中量子化准磁通的预测. 有序参数可写如[1]

1) Ψ 的这个表示法在描述 Josephson 效应时特别有用，那时有序参数的周相是有直接物理意义的[见例如 B. D. Josephson, *Advan. Phys.*, **14**: 419 (1965)].

$$\Psi = |\Psi| e^{i\varphi}, \tag{50.27}$$

这里 φ 是实的，代入方程 (50.9)，给出

$$\mathbf{j} = -\frac{e^* h}{m^*}|\Psi|^2 \nabla\varphi - \frac{(e^*)^2|\Psi|^2\mathbf{A}}{m^* c}, \tag{50.28}$$

或

$$\mathbf{A} + \frac{\mathbf{j} m^* c}{(e^*)^2|\Psi|^2} = -\frac{\hbar c}{e^*}\nabla\varphi. \tag{50.29}$$

把这方程沿着完全在超导电体内的闭合路径 C（图 49.2）积分，

$$\oint_C d\mathbf{l}\cdot\mathbf{A} + \frac{m^* c}{(e^*)^2}\oint_C \frac{d\mathbf{l}\cdot\mathbf{j}}{|\Psi|^2} = -\frac{\hbar c}{e^*}\oint_C d\mathbf{l}\cdot\nabla\varphi. \tag{50.30}$$

左边第一项可用 Stokes 定理改写；如假定 Ψ 为单值的，右边的积分必定是 2π 的整数 n 倍：

$$\int d\mathbf{S}\cdot\mathbf{h} + \frac{m^* c}{(e^*)^2}\oint_C \frac{d\mathbf{l}\cdot\mathbf{j}}{|\Psi|^2} = \pm n\frac{hc}{e^*}. \tag{50.31}$$

同方程 (49.22) 比较表明左边是 London 的准磁通 Φ 推广于非均匀系统，我们作出结论，Φ 是量子化的，其单位量子为 $\varphi_0 = hc/e^*$. 这里的推导只适用于温度接近 T_c 时，但看来可以期望对于一切 $T < T_c$ 有同样的量子化.

表面能

研究正常和超导电材料的分界面(见图50.1)所联系的能量，就最容易理解参数 κ 的重要意义.只有当正常区里有平行于表面的外加场 H_c 时，边界才是力学上稳定的，因为正常区深处的 Gibbs 自由能

$$G(z\to-\infty) = G_{n0} - \frac{H_c^2}{8\pi} \tag{50.32}$$

这时等于超导电区深处的

$$G(z \to \infty) = G_{s0}, \tag{50.33}$$

[比较方程 (48.21)]. 由于存在两种长度 λ 和 ξ，这就可能按照下述方式引起表面能. 如果样品是全部是正常的或全部是超导电的，每单位面积的 Gibbs 自由能应是 $\int_{-\infty}^{\infty} dz(-H_c^2/8\pi)$ 但是，在表面区，对于 $z \gtrsim \lambda$，磁通被逐出，同时凝聚能也要到 $z \gtrsim \xi$ 才建立起来. 所以，每单位面积的真正 Gibbs 自由能近似地由两项之和给出，

$$\approx \int_{-\infty}^{\lambda} dz \frac{-H_c^2}{8\pi} + \int_{\xi}^{\infty} dz \frac{-H_c^2}{8\pi}.$$

按定义，表面能 σ_{ns} 是每单位面积的实际 Gibbs 自由能减去假如样品是均匀地正常的或均匀地超导电的所得出的值之差，

$$\sigma_{ns} \approx -\frac{H_c^2}{8\pi}\left(\int_{-\infty}^{\lambda} dz + \int_{\xi}^{\infty} dz - \int_{-\infty}^{\infty} dz\right)$$

$$\approx (\xi - \lambda)\frac{H_c^2}{8\pi}. \tag{50.34}$$

我们看到，$\kappa \ll 1$ 时，σ_{ns} 为正，而 $\kappa \gg 1$ 时，σ_{ns} 为负.

Ginzburg-Landau 理论使我们能够详细得多地研究表面能. 考虑一维几何 (图 50.1)，磁场 $\mathbf{h}(z) = h(z)\hat{\mathbf{x}}$，矢量势 $\mathbf{A}(z) = A(z)\hat{\mathbf{y}}$. 在这个问题中，$\Psi$ 可用适当的规范选为实的[1]，而 Ginzburg-Landau 方程成为

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Psi'' - |a|\Psi + b\Psi^3 + (e^*)^2\frac{A^2\Psi}{2m^*c^2} = 0, \tag{50.35a}$$

$$-\frac{c}{4\pi}h' = \frac{(e^*)^2\Psi^2 A}{m^* c}, \tag{50.35b}$$

---

1) V. L. Ginzburg-L. D. Landau, 前引文. 如 $|\Psi|^2$ 只依赖于 z，有序参数取形式 $e^{i\varphi(x,y)}\Psi(z)$. 此外，Maxwell 方程意味 $\mathbf{j}(z) = j(z)\hat{\mathbf{y}}$. 方程 (50.9) 于是表明 $\Psi(z)$ 必须是实的而 $\partial\Psi/\partial x$ 为零. 剩下来的周相因子 $\varphi(y)$ 必须是 y 的线性函数，而用平凡的规范变换 $A \to A - (\hbar c/e^*)\partial\varphi/\partial y$ 可把 $\varphi(y)$ 吸收掉.

$$A' = -h, \tag{50.35 c}$$

这里的撇号表示对 z 求导数. 相应的边界条件

$$\begin{cases}\Psi = 0, \\ h = H_c\end{cases} (z \to -\infty), \quad \begin{cases}\Psi = |\Psi_\infty|, \\ h = 0\end{cases} (z \to +\infty) \tag{50.36}$$

保证方程 (50.32) 和 (50.33) 得以满足[1]. 按照表面能的同一定义,我们求得

$$\begin{aligned}\sigma_{ns} &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[G(z) - G_{n0} + \frac{H_c^2}{8\pi}\right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz [G(z) - G_{s0}] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[F(z) - \frac{h(z)H_c}{4\pi} - F_{n0} + \frac{H_c^2}{8\pi}\right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[a|\Psi|^2 + \frac{1}{2} b|\Psi|^4 + (2m^*)^{-1} \right. \\ &\qquad \left. \times \left| \left(-i\hbar\nabla + \frac{e^*\mathbf{A}}{c}\right)\Psi\right|^2 + \frac{(H_c - h)^2}{8\pi}\right]. \end{aligned} \tag{50.37}$$

这里的第三行和第四、五行分别是用(50.6) 和 (50.2)得到的. 如果把方程 (50.3 5a) 乘以 Ψ^* 并对所有的 z 积分, 则简单的分部积分给出

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \left[a|\Psi|^2 + b|\Psi|^4 + (2m^*)^{-1} \left| \left(-i\hbar\nabla + \frac{e^*\mathbf{A}}{c}\right)\Psi\right|^2\right] = 0.$$

代入方程 (50.37) 就给出最终的形式

$$\sigma_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[-\frac{1}{2} b|\Psi|^4 + \frac{(H_c - h)^2}{8\pi}\right]. \tag{50.38}$$

方程(50.37)和(50.38)两者都是严格的;前者从变分学上看也

1) 由于理想化了的一维几何,这些边界条件在 $z = +\infty$ 违背方程(50.8b). 一个较为实际的组态是放在螺线管中的长柱体, 柱体的宏观超导电核心被正常鞘包围着.

是正确的，而后者由于利用了严格的场方程式，从而比较简单一些.

按照常规，用长度 δ 表征表面能：

$$\sigma_{ns}=\frac{H_c^2}{8\pi}\delta, \tag{50.39}$$

这里

$$\delta\equiv\int_{-\infty}^{\infty}dz\left[-\left|\frac{\Psi}{\Psi_\infty}\right|^4+\left(1-\frac{h}{H}\right)^2\right], \tag{50.40}$$

它已借助于方程 (50.12) 和 (50.16) 改写过. 虽然需要用电子计算机求解方程 (50.35) 和 (50.36) 才可对任意的 κ 算出 δ，但特殊的极限情况已用解析方法研究过. 不过，数字计算的细节相当冗长，我们只叙述结果[1]

$$\delta=\begin{cases}\dfrac{4\sqrt{2}}{3}\xi\approx 1.89\xi & (\kappa\ll 1), \quad (50.41\,a)\\ 0 & \left(\kappa=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\right), \quad (50.41\,b)\\ -\dfrac{8}{3}(\sqrt{2}-1)\lambda\approx -1.10\lambda & (\kappa\gg 1), \quad (50.41\,c)\end{cases}$$

与方程 (50.34) 的定性估计相符.

为了决定超导电体在外加磁场中的行为，表面能是重要的，材料就按照 σ_{ns} 是正的或是负的而常规地归属于 I 类或 II 类. 与方程 (50.41) 相比较，给出下列判据

$$\begin{aligned}&\text{I 类：}\ \kappa<\frac{1}{\sqrt{2}},\quad \xi(T)>\sqrt{2}\lambda(T),\quad \sigma_{ns}>0;\\ &\text{II 类：}\ \kappa>\frac{1}{\sqrt{2}},\quad \xi(T)<\sqrt{2}\lambda(T),\quad \sigma_{ns}<0.\end{aligned} \tag{50.42}$$

---

1) V. L. Ginzbarg and L. D. Landau, 前引文; D. Saint-James, G. Sarma and E. J. Thomas, "Type II Superconductivity", chap. II, Pergamon Press, London, 1969.

I 类材料的表面能是正的，因而样品保持为空间均匀的，它对于一切 $H<H_c$ 展示完全的 Meissner 效应. 与此相反，磁场一旦超过下临界磁场 H_{c1}，II 类材料倾向于分裂为微观区畴(见习题 13.5)，这 H_{c1} 总是小于 H_c. 对于 $H>H_{c1}$，磁通以量子化的磁通线的形式穿透样品，我们就说样品处于混合态. 这态一直持续到上临界磁场 $H_{c2}=\sqrt{2}\,\kappa H_c$ (见习题13.6)；高于 H_{c2}，样品成为正常的. II 类超导电性的可能性是Abrikosov提出来的[1]，他用 Ginzburg-Landau 理论详细地研究了混合态. 遗憾的是，这里不能把这个广大的题目包括进来，我们必须请读者参考其他资料[2].

51. 微观 (BCS) 理论

本章的剩余部分讨论 Bardeen, Cooper 和 Schrieffer (BCS) 在 1957 年提出的微观模型[3]. 用了少数几个实验参数就把简单超导电体的各种性质联系起来并作出解释，BCS 的模型在这方面取得令人惊奇的成功. 这个模型的基态已经在第 37

1) A. A. Abrikosov *Sov. Phys.-JETP*, **5**:1174 (1957).

2) 参看，例如，P. G. de Gennes, "Superconductivity of Metals and Alloys", chap. 3, 6, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1966; A. L. Fetter and P. C. Hohenberg, Theory of Type-II Superconductors and B. Serin, Type II Superconductors: Experiments, in R. D. Parks (ed.), "Superconductivity" vol. II, chaps. 14, 15, Marcel Dekker, Inc., New York, 1969.

3) 我们发现下列书籍特别有用：P. G. de Gennes, 前引书；G. Rickayzen, "Theory of Superconductivity", John Wiley and Sons, Inc., New York, 1965; J. R. Schrieffer, "Theory of Superconductivity", W. A. Benjamin, Inc., New York, 1964；也可参看 A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshiskii, "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics", chap, 7, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1963. (阿布里科索夫等：统计物理学中的量子场论方法. 郝柏林译，科学出版社 1963)

节用正则变换加以确定. 这样的方法可推广到有限温度，但 Gorkov[1] 表明，改用温度 Green 函数来表述理论更好. 下面各节所讨论的这种近似描述，是第 27 节的 Hartree-Fock 理论的自然推广.

一般表述

从磁场中电子气体的下述模型正正则哈密顿函数出发

$$\hat{K} = \hat{K}_0 + \hat{V}$$

$$= \int d^3x \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left\{ \frac{1}{2m} \left[-i\hbar\nabla + \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c} \right]^2 - \mu \right\} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})$$

$$- \frac{1}{2} g \int d^3x \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \qquad (51.1)$$

这里 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ 是矢量势，而 $-e$ 是电子电荷. 第十二章中表明，声子的交换，引起靠近 Fermi 面的电子之间的有效吸引. 这种粒子间势，在这里已用强度 $g > 0$ 的吸引 δ 函数来近似[比较方程 (46.9)][2]. 微观理论的中心思想是，尽可能完全地解出这个模型哈密顿函数[3].

作为随后的讨论的引导，先回顾 Hartree-Fock 理论，这理论可把方程(51.1)中严格的作用算符 $\hat{V}$ 用双线性型来近似而得到，

$$\hat{V} \approx \hat{V}_{HF} \equiv -g \int d^3x [\langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \rangle_{HF} \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x})$$

---

1) L. P. Gorkov, *Sov. Phys.-JETP*, **7**:505(1958).

2) 由于这个势具有奇异性，有时会引起虚假的发散积分，按照第十二章中的讨论，这些积分应在 Debye 频率处被截断.

3) 电子—声子哈密顿函数[方程(46.1)]的超导解由下列作者研究过：N. N. Bogoliubov, *Sov. Phys. -JETP*, **7**:41 (1958) 和 G. M. Eliashberg, *Sov. Phys.-JETP*, **11**:696 (1960) 及**12**: 1000 (1961). 这一方法对于强耦合超导电体例如铅 (图 51.2 与表 51.1) 是重要的，强耦合超导电体不适合通常的 BCS 理论 [见，例如，J. R. Schrieffer, 前引书，chap. 7 及 W. L. Mc Millan, Phys. Rev., **167**:331(1968)].

$$-\langle\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\beta(\mathbf{x})\rangle_{HF}\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})]. \quad (51.2)$$

这里尖括号表示按下列密度算符取系综平均值，

$$\hat{\rho}_{HF}=\frac{e^{-\beta\hat{K}_{HF}}}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{K}_{HF}}}, \quad (51.3\,a)$$

其中

$$\hat{K}_{HF}=\hat{K}_0+\hat{V}_{HF}. \quad (51.3\,b)$$

在这一方法中，$\hat{K}_{HF}$ 用来定义有限温度 Heisenberg 算符 $\hat{\phi}_{K\gamma}(\mathbf{x},\tau)=e^{\hat{K}_{HF}\tau/\hbar}\hat{\phi}_\gamma(\mathbf{x})e^{-\hat{K}_{HF}\tau/\hbar}$，其运动方程为

$$\frac{\hbar\partial\hat{\phi}_{K\gamma}(\mathbf{x}\tau)}{\partial\tau}=-\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2-\mu\right]\hat{\phi}_{K\gamma}(\mathbf{x},\tau)$$
$$+g\langle\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})\rangle_{HF}\hat{\phi}_{K\gamma}(\mathbf{x},\tau)$$
$$-g\langle\hat{\phi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\phi}_\gamma(\mathbf{x})\rangle_{HF}\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x},\tau).$$

相应的单粒子 Green 函数为

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=-\langle T_\tau[\hat{\phi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\phi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau')]\rangle_{HF},$$

它满足习题 8.3 所导出的自洽运动方程，因而等同于第 27 节的 Hartree-Fock Green 函数(见习题 13.7). 这里，自洽性通过 $\hat{V}_{HF}$ 表现出来，$\hat{V}_{HF}$ 既决定方程 (51.3) 又取决于方程(51.3).

寻找严格的运动方程的线性近似，就可理解 $\hat{V}_{HF}$ 的精确结构. 既然对易式 $[\hat{V},\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})]$ 包含三个场算符，它必须用线性型来近似，$[\hat{V},\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})]\to f_{\alpha\beta}\hat{\phi}_\beta(\mathbf{x})$，这里 $f_{\alpha\beta}$ 是 c 数系数. 这一替换的结果为 $\{[\hat{V},\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})],\hat{\phi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})\}\to f_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})$. 事实上，这关系式的左边仍然是场算符的二次式. 所以，我们可以把它换作它的系综平均值，以得到线性化的理论，这提供了决定 $f_{\alpha\beta}$ 的条件. 方程 (51.2) 中的 $\hat{V}_{HF}$ 近似形式是选来再现相应的线性方程的.

我们还可以回想习题 4.4 和 8.3 中研究过的 Hartree-Fock 理论的另一推导. 与 Wick 定理类比，把四个费米子场算符的系综平均作如下分解：

$$\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(1)\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2)\hat{\psi}_{K\gamma}(3)\hat{\psi}_{K\delta}(4)]\rangle_{HF}$$
$$= \langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(1)\hat{K}_{K\delta}(4)\rangle_{HF}\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2)\hat{\psi}_{K\gamma}(3)]\rangle_{HF}$$
$$-\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(1)\hat{\psi}_{K\gamma}(3)]\rangle_{HF}$$
$$\times\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2)\hat{\psi}_{K\delta}(4)]\rangle_{HF}. \tag{51.4}$$

这步骤立刻给出 $\mathscr{G}$ 的 Hartree-Fock 方程；它还提供线性响应理论中出现的典型公式[见例如方程 (32.7) 和 (32.11)] 的一般处理方法.

现在，必须把上面的讨论推广，以包括超导电体的本质上是新的特点，即自旋相反的两电子形成自束缚 Cooper 对偶的可能性 (第 36 和 37 节). 作为这种现象的模型，对方程 (51.2) 额外加上两项以代表配对幅度:

$$\hat{V} \approx \hat{V}_{HF} - \frac{1}{2}g\int d^3x[\langle\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\beta(\mathbf{x})\rangle\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})$$
$$+\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\beta(\mathbf{x})\langle\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})\rangle]. \tag{51.5}$$

这个近似相当于，把项 $g_{\alpha\beta}\hat{\psi}^\dagger_\beta(\mathbf{x})$ 加于线性型 $f_{\alpha\beta}\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x})$[1]. 既然所得的 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^\dagger$ 的线性运动方程现在是互相耦合的，这理论不再使粒子数守恒. 确实，我们可把凝聚的那些 Cooper 对偶看作粒子储槽，这与第六章与第 35 节所讨论的 Bose 凝聚非常类似. 为协调一致，方程 (51.4) 的分解步骤也必须推广，以包括配对幅度[2]

$$\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(1)\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2)\hat{\psi}_{K\gamma}(3)\hat{\psi}_{K\delta}(4)]\rangle$$
$$= [T_\tau(\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(1)\hat{\psi}_{K\delta}(4)]\rangle\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2)\hat{\psi}_{K\gamma}(3)]\rangle$$
$$-\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(1)\hat{\psi}_{K\gamma}(3)]\rangle\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2)\hat{\psi}_{K\delta}(4)]\rangle$$
$$+\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(1)\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2)]\rangle$$
$$\times\langle T_\tau[\hat{\psi}_{K\gamma}(3)\hat{\psi}_{K\delta}(4)]\rangle. \tag{51.6}$$

---

1) P. G. de Gennes, 前引书, p. 141 证明这里选取的 $f_{\alpha\beta}$ 和 $g_{\alpha\beta}$ 使自由能极小.

2) L. P. Gorkov, 前引文.

虽然方程(51.5)中所有的项都可以保留，但完全略去通常的 Hartree-Fock 贡献 $\hat{V}_{HF}$，从而把正常态作为自由电子处理，就要简单得多.这一近似的根据是，可以假定 $\hat{V}_{HF}$ 在正常和超导电两相之中是一样的，它并不影响两种态的比较(见第 37 节的处理). 既然 Cooper 对偶的自旋为零，方程(51.5)中的指标 α 和 β 必须属于相反的自旋投影，而总的有效哈密顿函数成为

$$\hat{K}_{\text{eff}} = \hat{K}_0 - g\int d^3x[\langle\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{x})\rangle\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{x})\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{x}) + \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{x})\langle\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{x})\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{x})\rangle], \tag{51.7}$$

这构成 BCS 理论的基础. 这理论是自洽的，因为尖括号解释为用 $\hat{K}_{\text{eff}}$ 计算的系综平均；特别是，

$$\langle\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{x})\rangle = \frac{\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{K}_{\text{eff}}}\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{x})]}{\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{K}_{\text{eff}}}}$$

之类的量并不为零，因为 $[\hat{K}_{\text{eff}}, \hat{N}] \neq 0$.

现在引入 Heisenberg 算符

$$\begin{cases} \hat{\psi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}\tau) = e^{\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar}\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{x})e^{-\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar}, \\ \hat{\psi}^\dagger_{K\downarrow}(\mathbf{x}\tau) = e^{\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar}\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{x})e^{-\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar}, \end{cases} \tag{51.8}$$

它们满足线性运动方程

$$\begin{cases} \hbar\dfrac{\partial\hat{\psi}_{K\uparrow}}{\partial\tau} = -\left[\dfrac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla + \dfrac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2 - \mu\right] \times \hat{\psi}_{K\uparrow} - g\langle\hat{\psi}_\uparrow\hat{\psi}_\downarrow\rangle\hat{\psi}^\dagger_{K\downarrow}, \\ \hbar\dfrac{\partial\hat{\psi}^\dagger_{K\downarrow}}{\partial\tau} = \left[\dfrac{1}{2m}\left(i\hbar\nabla + \dfrac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2 - \mu\right] \times \hat{\psi}^\dagger_{K\downarrow} - g\langle\hat{\psi}^\dagger_\downarrow\hat{\psi}^\dagger_\uparrow\rangle\hat{\psi}_{K\uparrow}. \end{cases} \tag{51.9}$$

作为这种表述的最后一步，定义单粒子 Green 函数

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = -\langle T_\tau[\hat{\psi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}^\dagger_{K\uparrow}(\mathbf{x}'\tau')]\rangle, \tag{51.10}$$

这里选用了特定的自旋指标以简化记号. 把 $\mathcal{G}$ 对 τ 微分. 微分算符既作用于场算符，也作用于编“时”中隐含的阶跃函数，

这给出

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$
$$=-\hbar\delta(\tau-\tau')\langle\{\hat{\psi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}\tau),\hat{\psi}^{\dagger}_{K\uparrow}(\mathbf{x}'\tau')\}\rangle$$
$$-\left\langle T_\tau\left[\hbar\frac{\partial\hat{\psi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}\tau)}{\partial\tau}\hat{\psi}^{\dagger}_{K\uparrow}(\mathbf{x}'\tau')\right]\right\rangle$$
$$=-\hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(\tau-\tau')$$
$$-\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2-\mu\right]\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$
$$+g\langle\hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{x})\hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{x})\rangle\langle T_\tau[\hat{\psi}^{\dagger}_{K\downarrow}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}^{\dagger}_{K\uparrow}(\mathbf{x}'\tau')]\rangle. \tag{51.11}$$

这引导我们考虑两个新的函数

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')\equiv-\langle T_\tau[\hat{\psi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}_{K\downarrow}(\mathbf{x}'\tau')]\rangle, \tag{51.12a}$$
$$\mathcal{F}^{\dagger}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')\equiv-\langle T_\tau[\hat{\psi}^{\dagger}_{K\downarrow}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}^{\dagger}_{K\uparrow}(\mathbf{x}'\tau')]\rangle, \tag{51.12b}$$

而方程 (51.11) 成为

$$\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2+\mu\right]\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$
$$-g\langle\hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{x})\hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{x})\rangle\mathcal{F}^{\dagger}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$
$$=\hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(\tau-\tau'). \tag{51.13}$$

在通常的时间无关哈密顿函数的情况下，函数 $\mathcal{G}$，$\mathcal{F}$ 和 $\mathcal{F}^{\dagger}$ 只依赖于差 $\tau-\tau'$，引用下列缩写是方便的，

$$\Delta(x)\equiv g\mathcal{F}(\mathbf{x}\tau^{+},\mathbf{x}\tau)=-g\langle\hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{x})\hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{x})\rangle$$
$$=g\langle\hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{x})\hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{x})\rangle, \tag{51.14}$$

这定义了能隙函数 $\Delta(x)$[1]. 方程 (51.13) 和 (51.14) 相结合给出

---

1) 这里采用 A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinskii, 前引书, sec. 34 的规定，但一些作者 (例如, P. G. de Gennes, 前引书, p. 143) 则引入一个附加的负号.

$$\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2+\mu\right]$$
$$\times\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')+\Delta(\mathbf{x})\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$
$$=\hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(\tau-\tau'). \tag{51.15}$$

按相似的方式，容易看出函数 $\mathscr{F}$ 和 $\mathscr{F}^\dagger$ 遵守运动方程

$$\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2+\mu\right]\mathscr{F}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$
$$=-g\langle\hat{\phi}_\uparrow(\mathbf{x})\hat{\phi}_\downarrow(\mathbf{x})\rangle\langle T_\tau[\hat{\phi}^\dagger_{K\downarrow}(\mathbf{x}\tau)\hat{\phi}_{K\downarrow}(\mathbf{x}'\tau')]\rangle$$
$$=\Delta(\mathbf{x})\mathscr{G}(\mathbf{x}'\tau',\mathbf{x}\tau), \tag{51.16}$$

$$\left[\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{1}{2m}\left(i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2+\mu\right]\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')$$
$$=g\langle\hat{\phi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{x})\hat{\phi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{x})\rangle\langle T_\tau[\hat{\phi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}\tau)\hat{\phi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}'\tau')]\rangle$$
$$=\Delta^*(\mathbf{x})\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau'). \tag{51.17}$$

与超导电性有关的典型磁场 $\lesssim 10^3$ 高斯，以致弱的 Pauli 顺磁性可以完全忽略 ($\mu_0 H \ll k_B T_c$). 在这极限下，自旋的两个投影方向是等价的，这一点在 (51.16) 的右边已经用到.

对于大多数的目的来说，把方程 (51.15) 和 (51.17) 作为 $\mathscr{G}$ 和 $\mathscr{F}^\dagger$ 的一对耦合着的方程来考虑已经足够. 不过，把三个方程合为单个矩阵方程，就像第 20 节中那样[1]，是有确定优点的. 引入两分量的场算符

$$\hat{\Psi}_K(\mathbf{x},\tau)\equiv\begin{bmatrix}\hat{\phi}_{K\uparrow}(\mathbf{x}\tau)\\ \hat{\phi}^\dagger_{K\downarrow}(\mathbf{x}\tau)\end{bmatrix} \tag{51.18}$$

和 2 × 2 矩阵 Green 函数

$$\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')\equiv-\langle T_\tau[\hat{\Psi}_K(\mathbf{x}\tau)\Psi^\dagger_K(\mathbf{x}'\tau')]\rangle$$
$$=\begin{bmatrix}\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau') & \mathscr{F}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')\\ \mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau') & -\mathscr{G}(\mathbf{x}'\tau',\mathbf{x}\tau)\end{bmatrix}, \tag{51.19}$$

---

1) Y. Nambu, *Phys Rev.*, **117**:648 (1960).

相应的运动方程式成为

$$\mathscr{D}_{\mathbf{x}\tau}\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=\hbar\mathbf{1}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(\tau-\tau'),\quad(51.20)$$

这里 $\mathscr{D}_{\mathbf{x}\tau}$ 是矩阵微分算符

$$\mathscr{D}_{\mathbf{x}\tau}=\begin{bmatrix}\mathscr{D}_1 & \Delta(\mathbf{x})\\ \Delta^*(\mathbf{x}) & \mathscr{D}_2\end{bmatrix},\quad(51.21)$$

$$\mathscr{D}_1\equiv-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2+\mu,$$

$$\mathscr{D}_2\equiv-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla+\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2-\mu.$$

这种矩阵表述广泛地使用于超导电体中电子-声子作用的研究中[1]. 它还成为研究电磁场的规范不变性的方便基础[2]. 可惜，这里不可能考虑这些问题，一般地，我们将依靠原来的 Gorkov 方程 (51.15) 和 (51.17).

有关均匀介质的解

在一切有意义的情况下，哈密顿函数几乎总是与时间无关的，相应的 Green 函数只依赖于 $\tau-\tau'$. 于是，引进 Fourier 表示是有用的，

$$\mathscr{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=(\beta\hbar)^{-1}\sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n),\quad(51.22\text{ a})$$

$$\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=(\beta\hbar)^{-1}\sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\times\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n),\quad(51.22\text{ b})$$

这里的选择 $\omega_n=(2n+1)\pi/\beta\hbar$ 保证了固有的 Fermi 统计. 相应的运动方程是

---

1) J. R. Schrieffer, 前引书, chap. 7.

2) J. R. Schrieffer, 前引书, secs. 8—5 and 8—6.

$$\left[i\hbar\omega_n - \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla + \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2 + \mu\right]\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n)$$

$$+ \Delta(\mathbf{x})\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) = \hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \quad (51.23\,a)$$

$$\left[-i\hbar\omega_n - \frac{1}{2m}\left(i\hbar\nabla + \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2 + \mu\right]\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n)$$

$$- \Delta^*(\mathbf{x})\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) = 0, \quad (51.23\,b)$$

它们必须与自洽条件

$$\Delta^*(\mathbf{x}) = -g\langle\hat{\psi}_\downarrow^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{x})\rangle = g\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}\tau^\dagger,\mathbf{x}\tau)$$

$$= \frac{g}{\beta\hbar}\sum_n e^{-i\omega_n\eta}\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x},\mathbf{x},\omega_n) \quad (51.24)$$

一道求解. 在最一般的情况下，这些耦合方程必须添上 Maxwell 方程，后者使微观磁场 $\mathbf{h}=\mathrm{curl}\,\mathbf{A}$ 与超导电流 $\mathbf{j}$ 以及用以产生外加磁场的外电流联系起来.很清楚，完全的解析解是不可能的，所以我们只能转向极限情况.本节余下部分致力于零磁场中无限的大块超导电体的热力学.然后，我们考察两个例子，由于其中存在一个小参数，可以求出相当完全的解. 它们是：对弱磁场的线性响应(第 52 节)；靠近 T_c 处的行为，在那里能隙函数 $\Delta(\mathbf{x})$ 是小参数（第 53 节). 这些情况是特别有意义的，因为它们从微观上分别证明 London-Pippard 和 Ginzburg-Landau 理论是合理的.

无磁场时，可以令矢量势等于零，方程(51.23)和(51.24)取简单的平移不变形式

$$\left(i\hbar\omega_n + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \mu\right)\mathscr{G}(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\omega_n) + \Delta\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\omega_n)$$

$$= \hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \quad (51.25a)$$

$$\left(-i\hbar\omega_n + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \mu\right)\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\omega_n)$$

$$- \Delta^*\mathscr{G}(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\omega_n) = 0, \quad (51.25\,b)$$

$$\Delta^* = \frac{g}{\beta\hbar}\sum_n e^{-i\omega_n\eta}\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x}=0,\omega_n). \tag{51.26}$$

用通常的 Fourier 变换

$$\begin{cases} \mathscr{G}(\mathbf{x},\omega_n) = (2\pi)^{-3}\int d^3k\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\mathscr{G}(\mathbf{k},\omega_n), \\ \mathscr{F}^\dagger(\mathbf{x},\omega_n) = (2\pi)^{-3}\int d^3k\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{k},\omega_n), \end{cases} \tag{51.27}$$

我们得到一对代数方程

$$(i\hbar\omega_n - \xi_k)\mathscr{G}(\mathbf{k},\omega_n) + \Delta\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{k},\omega_n) = \hbar, \tag{51.28 a}$$

$$(-i\hbar\omega_n - \xi_k)\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{k},\omega_n) - \Delta^*\mathscr{G}(\mathbf{k},\omega_n) = 0, \tag{51.28 b}$$

这里[比较方程 (37.24)]

$$\xi_k \equiv \frac{\hbar^2k^2}{2m} - \mu. \tag{51.29}$$

这些方程容易解出，

$$\mathscr{G}(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{-\hbar(i\hbar\omega_n + \xi_k)}{\hbar^2\omega_n^2 + \xi_k^2 + |\Delta|^2}, \tag{51.30 a}$$

$$\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{\hbar\Delta^*}{\hbar^2\omega_n^2 + \xi_k^2 + |\Delta|^2}. \tag{51.30 b}$$

无外加场时；可取Δ为实的而不失一般性，从而保证

$$\mathscr{F}^\dagger(\mathbf{k},\omega_n) = \mathscr{F}(\mathbf{k},\omega_n), \tag{51.31}$$

对于均匀介质，可以从方程 (5.16) 很简单地推得此式. 另外，方程 (51.30) 可写为

$$\mathscr{G}(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{u_k^2}{i\omega_n - E_k/\hbar} + \frac{v_k^2}{i\omega_n + E_k/\hbar}, \tag{51.32 a}$$

$$\mathscr{F}(\mathbf{k},\omega_n) = \mathscr{F}^\dagger(\mathbf{k},\omega_n) = -u_kv_k\left[\frac{1}{i\omega_n - E_k/\hbar} - \frac{1}{i\omega_n + E_k/\hbar}\right], \tag{51.32 b}$$

这里

$$E_k = (\xi_k^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}}, \tag{51.33}$$

而

$$\begin{cases} u_k v_k = \dfrac{\Delta}{2E_k}, \\ v_k^2 = 1 - u_k^2 = \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{\xi_k}{E_k}\right), \end{cases} \tag{51.34}$$

它们正好是方程 (37.32) 和 (37.34) 所引进的量. 将它与方程 (21.9) 和 (21.10) 比较显示超导电体与凝聚 Bose 系统之间的紧密关系.

这里介质是均匀的，Δ 的自洽方程 (51.26) 成为

$$\Delta = \frac{g}{\beta\hbar}\sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\Delta}{(\hbar\omega_n)^2 + E_k^2}, \tag{51.35}$$

这里由于 $|n|$ 大时的收敛性，可置 $\eta = 0$. 这级数可以用迴路积分直接求和 (比较习题 7.6)，或者用方程 (51.32 b) 的分项分式分解来求和; 约去公共因子 Δ，求得

$$1 = g(2\pi)^{-3}\int d^3k (2E_k)^{-1}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right). \tag{51.36}$$

现在引入近似

$$(2\pi)^{-3}\int d^3k \cdots \approx N(0)\int d\xi \cdots,$$

这可以用来计算在 Fermi 面附近具有峰的积分. 所得的能隙方程是方程 (37.45) 的有限温度的推广. 它必须完全同样地在 $|\xi_k| = \hbar\omega_D \ll \epsilon_F$ 截断，而由于被积函数是对称的，可以写出

$$1 = gN(0)\int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{(\xi^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\tanh\frac{(\xi^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}}}{2k_B T}, \tag{51.37}$$

这决定了依赖于温度的函数 $\Delta(T)$. 既然现在的模型中

$$\xi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu,$$

态密度成为

$$N(0)=\frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2}, \tag{51.38}$$

这里 μ 已用 Fermi 波矢 k_F 表出[比较方程(37.47)]，并且忽略了正常态与超导电态之间的很小的自由能差.

能隙函数 $\Delta(T)$ 的决定

显然，当 $T\to 0$，方程(51.37)成为方程(37.48)，并给出同样的解 $\Delta_0=2\hbar\omega_D e^{-1/N(0)g}$. 在相反的极限 $(T\to T_c)$，能隙恒为零，我们求得

$$1=gN(0)\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{d\xi}{\xi}\tanh\frac{\xi}{2k_BT_C}. \tag{51.39}$$

为从这方程求解 T_c，引进无量纲积分变数 z 是方便的

$$\frac{1}{N(0)g}=\int_0^Z\frac{dz}{z}\tanh z, \tag{51.40}$$

这里的截断 $Z=\hbar\omega_D/2k_BT_c$ 是重要的，因为对于 $Z\to\infty$，这积分对数式发散. 分部积分:

$$\frac{1}{N(0)g}=[\ln z\tanh z]_0^Z-\int_0^Z dz\ln z\operatorname{sech}^2 z. \tag{51.41}$$

在一切有意义的情况下，上限很大(见表 51.1)，方程(51.41)可近似为

$$\frac{1}{N(0)g}=\ln\left(\frac{\hbar\omega_n}{2k_BT_c}\right)-\int_0^\infty dz\ln z\operatorname{sech}^2 z, \tag{51.42}$$

这个定积分在附录 A 中给出. 简单的整理给出

$$k_BT_c=\frac{2e^\gamma}{\pi}\hbar\omega_D e^{-1/N(0)g}\approx 1.13\hbar\omega_D e^{-1/N(0)g}. \tag{51.43}$$

我们看到，T_c 和零温度能隙 $\Delta(T=0)\equiv\Delta_0$ [方程(37.49)]两者都灵敏地依赖于参数 $N(0)g$；组成它们的比值时，这依

赖性互相约去，

$$\frac{\Delta_0}{k_B T_c} = \pi e^{-\gamma} \approx 1.76, \tag{51.44}$$

这是普适常数，与特定材料无关.

表 51.1　典型超导电体的热力学性质

	T_c(K)	$\theta = \hbar\omega_D/k_B$ (K)	$N(0)g$[1]	$\frac{\Delta_0}{k_B T_c}$	$H_c(0)$ (奥)	$\frac{T_c C_n(T_c)}{H_c(0)^2 V}$	$\frac{C_s - C_n}{C_n}\Big\|_{Tc}$
BCS				1.48		0.168	1.43
Cd (镉)	0.56	164	0.18	1.6	29	0.177	1.32—1.40
Al (铝)	1.2	375	0.18	1.3—2.1	106	0.171	1.45
Sn (锡)	3.75	195	0.25	1.6	305	0.161—0.164	1.60
Pb (铅)	7.22	96	0.39	2.2	805	0.134	2.71

1) $N(0)g$ 是从方程 (51.43)算出的.
来源: R. Meservey and B. B. Schwartz, Equilibrium Properties: Comparison of Experimental Results with Predictions of BCS Theory, in R. D. Parks (ed.) "Superconductivity", vol. I, pp. 122, 141, 165, Marcel Dekker, Inc., New York, 1969; D. Shoenberg, "Superconductivity, 2d ed., p. 226, Cambridge University Press, Cambridge, 1952.

像在表 51.1 中看到的那样，上述关系式很好地符合实际情况. 对于给定的元素，方程 (51.43) 表明 T_c 正比于截止 $\omega_D \propto M^{-\frac{1}{2}}$，从而给出方程 (36.2) 和 (48.6) 中所讨论的同位素效应. 比值 $\theta/T_c = \hbar\omega_D/k_B T_c$ 还决定有效作用 $N(0)g \equiv N(0)\gamma^2$，这 γ 是方程(45.12)中的电子-声子耦合常数. 对于带电荷 ze 的离子，与方程 (51.38) 的结合导至

$$N(0)\gamma^2 = \frac{z^{\frac{5}{3}}}{2(3\pi^2)^{\frac{1}{3}}} \frac{\hbar^2 n_0^{\frac{2}{3}}}{m} \frac{\pi^2}{M c_l^2}, \tag{51.45}$$

在表51.1 中，原子价最低的是镉，对于镉 ($z=2$, $n_0 M = 8.6$克/

厘米^3，$c_l = 2.78 \times 10^5$ 厘米/秒)，观测值[1] 给出 $N(0)\gamma^2 \approx 0.54$. 与表 51.1 中的数值近似符合，这是声子交换在超导电中的重要性的证据[2].

能隙参数对温度的依赖关系可从方程 (51.37) 导出. 既然它的求解需要数值方法，我们并不企图作详细的分析，而只是叙述其极限行为(见习题 13.9)

$$\Delta(T) \approx \Delta_0 - (2\pi\Delta_0 k_B T)^{\frac{1}{2}} e^{-\Delta_0/k_B T} (T \ll T_c), \quad (51.46\,a)$$

$$\Delta(T) \approx k_B T_c \pi \left[\frac{8}{7\zeta(3)}\right]^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx 3.06\, k_B T_c \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (T_c - T \ll T_c). \quad (51.46b)$$

完整的函数示于图 51.1.

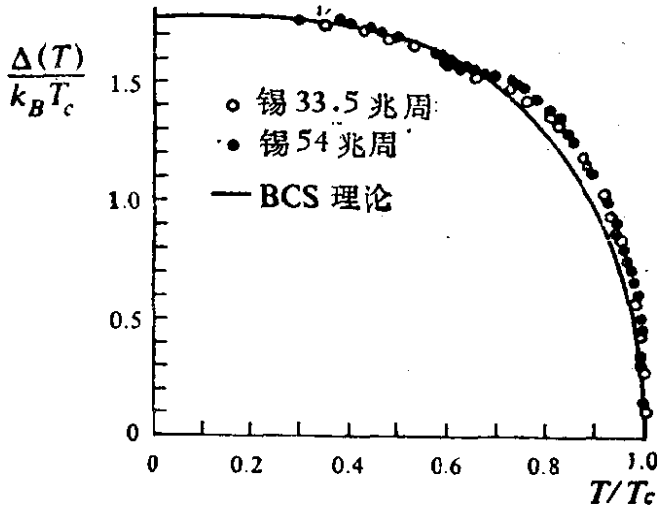


图 51.1 锡的 $\Delta(T)/k_B T_c$ 的变化，由超导电态和正常态的相对超声衰减测出 (见习题 13.19). [引自 R. W. Morse and H. V. Bohm, *Phys. Rev.*, **108**:1094 (1957).]

1) 见例如 C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics," 2d ed., pp. 100 and 259, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1956.

2) 理论与实验的比较由于库仑排斥作用而变得复杂(见例如 G. Rickayzen, 前引书, sec. 5.7 与 W. L. McMillan, 前引文).

热力学函数

热力学势可由基本方程 (23.21) 决定. 既然我们的模型在正常态和超导电态两者中都略去了通常的 Hartree-Fock 项，正常态的热力学势就是自由 Fermi 气体的热力学势 Ω_0，并且我们求得

$$\begin{aligned}\Omega_s - \Omega_n &= \int_0^1 d\lambda \lambda^{-1} \langle \lambda \hat{H}_1 \rangle \\ &= -\frac{1}{2}\int_0^g \frac{dg'}{g'} \int d^3x g' \langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \rangle \\ &\approx -\int_0^g dg' \left(\frac{1}{g'}\right)^2 \int d^3x |\Delta(\mathbf{x})|^2, \end{aligned} \tag{51.47}$$

第二行和第三行曾用到方程 (51.1)，(51.6) 和 (51.14). 注意 $\langle \lambda \hat{H}_1 \rangle$ 与方程 (51.7) 最后一项的系综平均值相差一个因子 1/2. 这因子总是出现于 Hartree-Fock 理论，并可在方程 (27.20) 中看到.

对于这里的均匀系统，空间积分只不过引入一个因子 V；简单的变数代换给出

$$\begin{aligned}\Omega_s - \Omega_n &= -V \int_0^g dg' \left(\frac{1}{g'}\right)^2 \Delta^2 \\ &= V \int_0^g dg' \frac{d(1/g')}{dg'} \Delta^2 \\ &= V \int_0^\Delta d\Delta' (\Delta')^2 \frac{d(1/g)}{d\Delta'}. \end{aligned} \tag{51.48}$$

这最后的形式特别方便，因为方程 (51.37) 把 $1/g$ 表为 $\Delta(T)$ 的函数，直接代入就得到

$$\frac{\Omega_s - \Omega_n}{V} = N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \int_0^\Delta d\Delta' (\Delta')^2 \frac{\partial}{\partial \Delta'} \frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E'\right)}{E'}$$

$$= N(0)\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi\left[\frac{\Delta^2}{E}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right)\right.$$

$$\left. - 2\int_0^{\Delta} d\Delta'\frac{\Delta'}{E'}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E'\right)\right], \qquad (51.49)$$

第二行是用分部积分得到的. 第一项正是能隙方程 (51.37) 的右边,第二项中可以通过变数转换把 Δ' 换成

$$E' = [(\Delta')^2 + \xi^2]^{\frac{1}{2}}$$

而简化. 按这方式,我们求得

$$\frac{\Omega_s - \Omega_n}{V} = N(0)\Delta^2\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{d\xi}{E}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right)$$

$$- \frac{4N(0)}{\beta}\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \ln\frac{\cosh\left(\frac{1}{2}\beta E\right)}{\cosh\left(\frac{1}{2}\beta\xi\right)}$$

$$= \frac{\Delta^2}{g} - \frac{4N(0)}{\beta}\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi\left[\ln(1 + e^{-\beta E})\right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\beta(E - \xi)\right] + \frac{4N(0)}{\beta}$$

$$\times \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \ln(1 + e^{-\beta\xi}). \qquad (51.50)$$

既然 $\hbar\omega_D \gg k_B T$, 右边最后那个积分可扩展到无限大. 于是,简易的计算表明,它等于正常态热力学势的与温度有关的第一级改正[比较方程 (5.53)]:

$$4\frac{N(0)V}{\beta}\int_0^{\infty} d\xi \ln(1 + e^{-\beta\xi})$$

$$= \frac{1}{3}N(0)V\pi^2(k_B T)^2 \approx -[\Omega_n(T) - \Omega_n(0)]. \qquad (51.51)$$

此外, 容易验证

$$-2N(0)\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi(E-\xi)$$

$$\approx -N(0)\left(\frac{1}{2}\Delta^2+\Delta^2\ln\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta}\right)$$

$$=-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2-\frac{\Delta^2}{g}-N(0)\Delta^2\ln\frac{\Delta_0}{\Delta}, \qquad (51.52)$$

这里用了方程(37.48)以消去$\ln(2\hbar\omega_D/\Delta_0)$. 方程(51.50)到(51.52)的结合给出

$$\frac{\Omega_s-\Omega_n}{V}=-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2-N(0)\Delta^2\ln\left(\frac{\Delta_0}{\Delta}\right)$$

$$-4N(0)k_BT\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi\ln(1+e^{-\beta E})$$

$$+\frac{1}{3}\pi^2N(0)(k_BT)^2, \qquad (51.53)$$

这里假定了不等式 $T\leqslant T_c\ll\theta\ll T_F$.

这个表示式在 $T=0$ 时正确地化为方程(37.53). 还可以从它算出首要的低温改正项，这改正项完全来自正常态的贡献，因为对于 $T\to 0$，$\Delta-\Delta_0$ 指数式地趋于零[方程(51.46 a)]. 用方程(23.9)和(51.32 a)，直接计算表明，对于一切 $T\leqslant T_c$，$N_s\approx N_n$ [比较方程(37.51)和(37.52)]，所以可把方程(51.53)重新解释为

$$\frac{F_s-F_n}{V}\approx -\frac{1}{2}N(0)\Delta_0^2$$

$$+\frac{1}{3}\pi^2N(0)(k_BT)^2\ (T\to 0). \qquad (51.54)$$

与方程(48.22)和(51.44)的结合，给出低温临界磁场

$$H_c(T)=[4\pi N(0)\Delta_0^2]^{\frac{1}{2}}\left[1-\frac{e^{2\gamma}}{3}\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]$$

$$\approx H_c(0)\left[1-1.06\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right] \quad (T\to 0), \tag{51.55}$$

这里

$$H_c(0)=[4\pi N(0)\Delta_0^2]^{\frac{1}{2}} \tag{51.56}$$

是 $T=0$ 的临界磁场. 既然 $N(0)$ 决定正常态比热 [比较方程 (5.59) 和 (51.38)]

$$\frac{C_n}{V}=\frac{2\pi^2}{3}N(0)k_B^2T, \tag{51.57}$$

方程 (51.44) 和 (51.56) 一起预言了第二个普适常数

$$\frac{T_cC_n(T_c)}{H_c^2(0)V}=\frac{e^{2\gamma}}{6\pi}\approx 0.168, \tag{51.58}$$

这是与问题中的材料无关的. 这些参数中每一个都是可测量的,实验的验证是令人满意的(表 51.1).

计算 Ω_s 本身也是有意义的,这可从方程 (51.51) 和 (51.53) 得到,

$$\frac{\Omega_s}{V}=\frac{\Omega_n(T=0)}{V}-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2\left(1+2\ln\frac{\Delta_0}{\Delta}\right)$$
$$-4N(0)k_BT\int_0^{\hbar\omega_D}d\xi\ln(1+e^{-\beta E}). \tag{51.59}$$

在这里的低温极限下,可以令 $\hbar\omega_D\to\infty$ 且 $\Delta\approx\Delta_0$ 以计算积分;近似计算给出

$$\int_0^\infty d\xi\ln\{1+\exp[-\beta(\xi^2+\Delta_0^2)^{\frac{1}{2}}]\}$$
$$\approx\frac{1}{2}e^{-\beta\Delta_0}(2\pi\Delta_0\beta^{-1})^{\frac{1}{2}},$$

这可以与方程 (51.46 a) 和 (51.59) 结合而给出

$$\frac{\Omega_s}{V}\approx\frac{\Omega_n(T=0)}{V}-\frac{1}{2}N(0)\Delta_0^2$$
$$-2N(0)\left(\frac{2\pi\Delta_0}{\beta^3}\right)^{\frac{1}{2}}e^{-\beta\Delta_0}. \tag{51.60}$$

于是，超导电态的电子比热可由微分上式得出，

$$\frac{C_s}{V} \approx 2N(0)\Delta_0 k_B(2\pi)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\Delta_0}{k_BT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\Delta_0/k_BT} \quad (T\to 0). \tag{51.61}$$

这个式子显然表明方程 (36.1) 和 (48.5) 提到过的能隙.

上面的计算只考虑了低温行为，在低温下，$\Delta-\Delta_0$ 是指数式小量.虽然就一切 $T<T_c$ 一般算出方程 (51.53) 需要数值分析，但有可能导出靠近 T_c 时的显式，这里 $\beta\Delta\ll 1$ 提供了一个小参数. 以能隙方程 (51.35) 为起点，它可用 Δ 的幂展开：

$$\begin{aligned}\frac{1}{g} &= \frac{2N(0)}{\beta}\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \sum_n \frac{1}{(\hbar\omega_n)^2+\xi^2+\Delta^2}\\ &\approx \frac{2N(0)}{\beta}\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \sum_n \left\{\frac{1}{(\hbar\omega_n)^2+\xi^2}\right.\\ &\quad \left.-\frac{\Delta^2}{[(\hbar\omega_n)^2+\xi^2]^2}+\cdots\right\}.\end{aligned}$$

容易算出对 Δ 的导数，与方程 (51.48) 相结合给出

$$\frac{\Omega_s-\Omega_n}{V} = -\frac{N(0)\Delta^4}{\beta}\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \sum_n \frac{1}{[(\hbar\omega_n)^2+\xi^2]^2}. \tag{51.62}$$

既然 $\hbar\omega_D \gg k_BT_c$，积分可扩展到无限大：

$$\begin{aligned}\frac{\Omega_s-\Omega_n}{V} &= -\frac{N(0)\Delta^4}{\beta}\sum_n \frac{\pi}{4}\frac{1}{|\hbar\omega_n|^3}\\ &= -\frac{1}{2}N(0)\Delta^4\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)^3}\\ &= -\frac{7\zeta(3)}{8}N(0)\Delta^4\frac{\beta^2}{2\pi^2}\\ &= -\frac{8}{7\zeta(3)}N(0)(\pi k_BT_c)^2\frac{1}{2}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^2,\end{aligned} \tag{51.63}$$

第三行用到被加式的对称性，最后一行用到 $\Delta(T)$ 的显式即

方程 (51.46 b)[1].

方程 (48.22) 又决定临界磁场，我们求得

$$H_c(T) = H_c(0)e^{\gamma}\left[\frac{8}{7\zeta(3)}\right]^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)$$

$$\approx 1.74\,H_c(0)\left(1-\frac{T}{T_c}\right)(T \to T_c), \quad (51.64)$$

这里 $H_c(0)$ 取自方程(51.56). 注意方程(51.55) 和 (51.64)跟唯象的关系式 (48.3) 很相似. 不过，还是存在着小的但显著的差别 (图 51.2)，对于大多数简单的超导电体，BCS 的预测提供较好的拟合. 既然 $H_c^2/8\pi$ 是正常态和超导电态之间实际的自由能密度差，理论与实验的出色相符证明我们的假定是

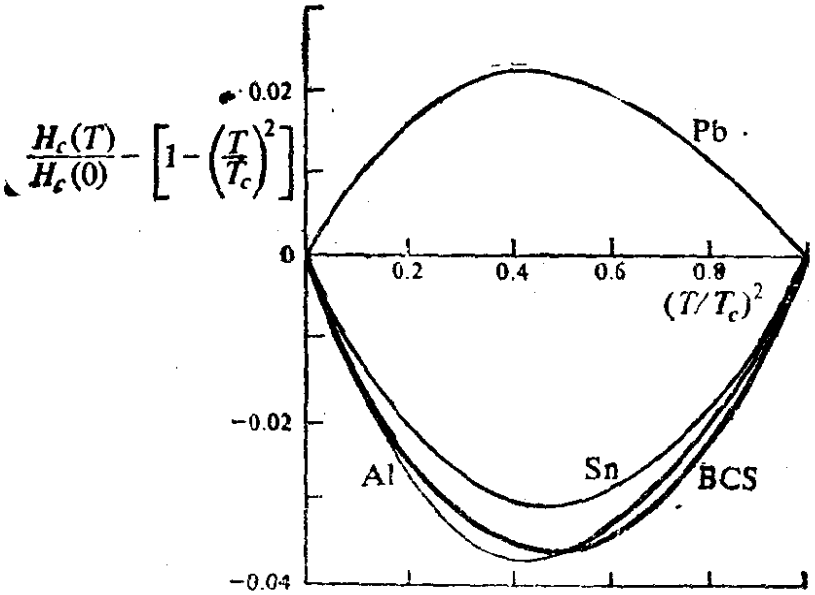


图 51.2 实际的临界磁场 $H_c(T)/H_c(0)$ 与经验曲线 $1-(T/T_c)^2$ 的差. (引自 *I. B. M. Journal of Research and Development*, vol. 6, no. 1, Jan. 1962.)

1) 类似于方程 (37.52) 中的论证表明，$F_s(N) - F_n(N) = \Omega_s(\mu_n) - \Omega_n(\mu_n)$，只有数量级为 $(\mu_s-\mu_n)^2/\mu_n^2$ 的改正. 所以可用方程 (51.63) 决定 T_c 附近的 $\mu_s - \mu_n$. 用方程 (51.38) 和 (51.44) 进行的简单计算给出

$$N(\mu_s - \mu_n)/(F_s - F_n) = \frac{1}{3} + 2(\partial \ln \Delta_0/\partial \ln N)T_c/(T_c - T).$$

合理的，即两态的 Hartree-Fock 能量是相同的.要想用直接推导来证明这个假定合理，那是极为困难的,因为凝聚能($\approx 10^{-7}$电子伏/粒子)是远远小于 Hartree-Fock 能量(≈ 1 到 10 电子伏/粒子). 方程 (51.63) 还可以用来计算比热在 T_c 的跃变[比较方程 (48.27)]

$$\frac{1}{V}(C_s - C_n)|_{T_c} = \frac{8}{7\zeta(3)} N(0)\pi^2 k_B^2 T_c, \qquad (51.65)$$

与方程 (51.57) 结合给出

$$\left[\frac{C_s - C_n}{C_n}\right]_{T_c} = \frac{12}{7\zeta(3)} \approx 1.43, \qquad (51.66)$$

这与实验相当符合(表 51.1).

52. 对弱磁场的线性响应

作为微观理论的进一步应用，现在转到超导电体的电动力学性质，这也许是超导电体最令人惊异的特性. 从原则上讲,一切这类效应都包含在 Gorkov 方程 (51.15) 和 (51.17) 中，但这些方程在其最一般的形式下是很不容易求解的. 由于这一原因,用第 32 节的线性响应一般理论来计算大块超导电体的电动力学,是较为简单的[1]. 具体说,我们将计算,由横向矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{x}t)$ 规定的外加磁场所感生的横向电流 $\mathbf{j}(\mathbf{x}t)$. 虽然在整个计算中保持完全的规范不变性是可能的[2],但这样一来细节变得十分复杂，并有可能遮掩简单的物理结果. 所

1) 用 Gorkov 方程的微扰展开可导出同样的结果,证明见 A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinskii, 前引书 sec. 37.

2) 这个问题的仔细研究见于 P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **110**: 827 (1958) 和 **112**: 1900(1958); D. Pines and P. Nozières, "The Theory of Quantum Liquids", vol. I, sec 4.7, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1966; Rickayzen, 前引书, chap. 6; J. R. Schrieffer, 前引书; chap. 8.

以这里的计算将用 London 规范进行：

$$\mathrm{div}\mathbf{A}(\mathbf{x}t) = 0, \qquad \mathbf{q}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q},\omega) = 0. \tag{52.1}$$

更一般地，矢量场 $\mathbf{A}(\mathbf{q},\omega)$ 总可以分解为纵向和横向两部分

$$\mathbf{A}^l(\mathbf{q},\omega) = \hat{q}[\hat{q}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q},\omega)],$$
$$\mathbf{A}^t(\mathbf{q},\omega) = \mathbf{A}(\mathbf{q},\omega) - \hat{q}[\hat{q}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q},\omega)], \tag{52.2a}$$

这里，按定义，

$$\mathbf{q}\times\mathbf{A}^l(\mathbf{q},\omega) = 0, \qquad \mathbf{q}\cdot\mathbf{A}^t(\mathbf{q},\omega) = 0. \tag{52.2 b}$$

矢量势 $\mathbf{A}$ 和标量势 φ 的一般规范变换为

$$\begin{cases}\mathbf{A}(\mathbf{q},\omega)\to\mathbf{A}(\mathbf{q},\omega) + i\mathbf{q}\Lambda(\mathbf{q},\omega),\\ \varphi(\mathbf{q},\omega)\to\varphi(\mathbf{q},\omega) + i\omega c^{-1}\Lambda(\mathbf{q},\omega).\end{cases} \tag{52.3}$$

这里 Λ 是任意的标量函数．显然，规范变换只影响纵向部分 $(\mathbf{A}^l\to\mathbf{A}^l + i\mathbf{q}\Lambda)$，所以 $\mathbf{A}^t$ 是规范不变的．

一般核的导出

有矢量势时，总哈密顿函数算符 $\hat{H}_t$ 就是方程（51.1）中所给出的

$$\hat{H}_t = \hat{H} + \hat{H}_A, \tag{52.4}$$

这里 $\hat{H}$ 是零场中的哈密顿函数

$$\hat{H} = \int d^3x\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})$$
$$-\frac{1}{2}g\int d^3x\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \tag{52.5}$$

而 $\hat{H}_A$ 是微扰

$$\hat{H}_A = \int d^3x\left\{\frac{e\hbar}{2mci}[\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\nabla\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})\right.$$
$$-(\nabla\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}))\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})]\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x})$$
$$\left.+\frac{e^2}{2mc^2}|\mathbf{A}(\mathbf{x})|^2\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})\right\}. \tag{52.6}$$

前面已讲过，e 是正的，而电子电荷是$-e$. 就任意算符 $\hat{O}(\mathbf{x}t)$ 而言，存在矢量势时，系综平均 $\langle\hat{O}(\mathbf{x}t)\rangle_A$ 由下式给出，计算到最低级[比较方程 (32.2)]，

$$\langle\hat{O}(\mathbf{x}t)\rangle_A = \langle\hat{O}_H(\mathbf{x}t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\langle[\hat{O}_H(\mathbf{x}t), \hat{H}_A(t')]\rangle, \tag{52.7}$$

这里未加标记的尖括号表示，在未微扰但有相互作用的系综中取平均. 既然将要处理的算符是使粒子数守恒的，那就可以把 Heisenberg 图像换为用 $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ 定义的

$$\hat{O}_K(\mathbf{x}t) = e^{i\hat{K}t/\hbar}\hat{O}(\mathbf{x})e^{-i\hat{K}t/\hbar} \tag{52.8}$$

[比较方程 (32.6)].

现在把方程 (52.7) 具体化，用于 $\mathbf{A}$ 存在时的总电磁电流 $\hat{\mathbf{j}}$. 这算符具有直观的形式

$$\hat{\mathbf{j}} = -\frac{1}{2}e[\hat{\phi}_\alpha^\dagger\mathbf{v}\hat{\phi}_\alpha + (\mathbf{v}\hat{\phi}_\alpha)^\dagger\hat{\phi}_\alpha], \tag{52.9}$$

这里[比较方程(49.5)]$\mathbf{v} = m^{-1}(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}/c)$. 简单的计算导致

$$\hat{\mathbf{j}} = -\frac{e\hbar}{2mi}[\hat{\phi}_\alpha^\dagger\nabla\hat{\phi}_\alpha - (\nabla\hat{\phi}_\alpha^\dagger)\hat{\phi}_\alpha] - \frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\hat{\phi}_\alpha^\dagger\hat{\phi}_\alpha, \tag{52.10}$$

而从 $\hat{\phi}$ 和 $\hat{\phi}^\dagger$ 的场方程容易验证，第二项对于保证电流守恒是重要的. 方程 (52.7) 与 (52.10) 结合给出

$$\langle\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}t)\rangle_A = \langle\hat{\mathbf{j}}_K(\mathbf{x}t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\langle[\hat{\mathbf{j}}_K(\mathbf{x}t), \hat{H}_A(t')]\rangle. \tag{52.11}$$

展开到 $\mathbf{A}$ 的第一级就得到线性响应；既然在零场中 $\hat{\mathbf{j}}$ 的期待值为零，我们求得

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}t) \equiv \langle \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}t)\rangle_A$$
$$= -\frac{e^2\mathbf{A}(\mathbf{x}t)}{mc}\langle \hat{\psi}^\dagger_{Ka}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{Ka}(\mathbf{x}t)\rangle$$
$$+ \frac{i}{\hbar c}\int_{-\infty}^{t} dt' \int d^3x' \langle [\hat{\mathbf{j}}^0_K(\mathbf{x}t), \hat{\mathbf{j}}^0_K(\mathbf{x}'t')$$
$$\cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}'t')]\rangle, \qquad (52.12)$$

这里

$$\hat{\mathbf{j}}^0_K(\mathbf{x}t) = -\frac{e\hbar}{2mi}\{\hat{\psi}^\dagger_{Ka}(\mathbf{x}t)\nabla\hat{\psi}_{Ka}(\mathbf{x}t)$$
$$- [\nabla\hat{\psi}^\dagger_{Ka}(\mathbf{x}t)]\hat{\psi}_{Ka}(\mathbf{x}t)\} \qquad (52.13)$$

是 $\mathbf{A} = 0$ 的电流算符. 把这方程改写为矢量势 $\mathbf{A}$ 与感生超导电流 $\mathbf{j}$ 之间的积分关系式[比较方程 (49.31)]

$$j_k(\mathbf{x}t) = -\frac{c}{4\pi}\int d^3x'\,dt' K_{kl}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') A_l(\mathbf{x}'t') \qquad (52.14)$$

是方便的,这里拉丁字母下标表示矢量的分量,凡重复出现在一项中就代表遍及三个空间坐标求和. 介质的具体性质包含于核中,

$$K_{kl}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{4\pi e^2}{mc^2}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(t-t')\delta_{kl}\langle \hat{n}_K(\mathbf{x}t)\rangle$$
$$+ \frac{4\pi}{\hbar c^2} P^R_{kl}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t'), \qquad (52.15)$$

问题于是归结为,计算严格未微扰系统中的推迟电流对易式

$$P^R_{kl}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv -i\langle [\hat{j}^0_{Kk}(\mathbf{x}t), \hat{j}^0_{Kl}(\mathbf{x}'t')]\rangle\theta(t-t'). \qquad (52.16)$$

第五章和第九章的讨论曾指出,推迟函数不便于微扰分析,因而我们引入温度函数

$$\mathscr{P}_{kl}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \equiv -\langle T_\tau[\hat{j}^0_{Kk}(\mathbf{x}\tau)\hat{j}^0_{Kl}(\mathbf{x}'\tau')]\rangle, \qquad (52.17)$$

这里是用“Heisenberg”图像来定义的

$$\hat{O}_K(\mathbf{x}\tau) = e^{\hat{K}\tau/\hbar}\hat{O}(\mathbf{x})e^{-\hat{K}\tau/\hbar}. \qquad (52.18)$$

方程 (52.16) 和 (52.17) 之间的关系，容易用 Lehmann 表示来建立，这种表示给出

$$P^{R}_{kl}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\rho_{kl}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega')}{\omega-\omega'+i\eta},\qquad(52.19)$$

$$\mathscr{P}_{kl}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\nu_n)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\rho_{kl}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega)}{i\nu_n-\omega'},\qquad(52.20)$$

这里的 Fourier 变换的定义与方程 (32.12) 和 (32.13) 中的相同，而 $\nu_n=2n\pi/\beta\hbar$.

函数 $\mathscr{P}_{kl}$ 可改写为，空间微分算符作用于场算符的编“时”乘积

$$\begin{aligned}\mathscr{P}_{kl}(1,1')=-\left(\frac{e\hbar}{2mi}\right)^2\{&(\nabla_1-\nabla_2)_k(\nabla_{1'}-\nabla_{2'})_l\\&\times\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(2)\hat{\psi}_{K\alpha}(1)\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2')\\&\times\hat{\psi}_{K\beta}(1')]\rangle\}_{\substack{2'=1'^+\\2=1^+}},\end{aligned}\qquad(52.21)$$

宗量 1 是变数 $(\mathbf{x}_1,\tau_1)$ 的缩写. 这方程是严格的，但现在必须引进近似. Schafroth[1] 已证明，按电子-声子相互作用来展开，到微扰论的一切级，都决不可能给出 Meissner 效应. 所以我们借助 Gorkov 自洽分解[方程 (51.6)] 写出

$$\begin{aligned}&\langle T_\tau[\hat{\psi}^\dagger_{K\alpha}(2)\hat{\psi}_{K\alpha}(1)\hat{\psi}^\dagger_{K\beta}(2')\hat{\psi}_{K\beta}(1')]\rangle\\&\quad\approx 4\mathscr{G}(12)\mathscr{G}(1'2')-2\mathscr{G}(12')\mathscr{G}(1'2)\\&\quad\quad+2\mathscr{F}(11')\mathscr{F}^\dagger(2'2),\end{aligned}\qquad(52.22)$$

这里 $\mathscr{G}$ 和 $\mathscr{F}$ 是 Gorkov 函数，自旋求和已算出. 方程 (52.21) 和 (52.22) 结合给出

$$\begin{aligned}\mathscr{P}_{kl}(1,1')=-\left(\frac{e\hbar}{2mi}\right)^2\{&(\nabla_1-\nabla_2)_k(\nabla_{1'}-\nabla_{2'})_l\\&\times[4\mathscr{G}(12)\mathscr{G}(1'2')-2\mathscr{G}(12')\mathscr{G}(1'2)\end{aligned}$$

1) M. R. Schafroth, 前引文.

$$+2\mathscr{G}(11')\mathscr{G}^{\dagger}(2'2)]\}_{\substack{2'=1'+\\2=1^{+}}}. \qquad (52.23)$$

现在具体专讲均匀的时间无关系统将是方便的，这里

$$\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\tau-\tau')$$

可用 Fourier 展开表出

$$\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\tau-\tau')=(2\pi)^{-3}\int d^3q\,e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}(\beta\hbar)^{-1}\times\sum_n e^{-i\nu_n(\tau-\tau')}\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{q},\nu_n). \qquad (52.24)$$

相应的 Fourier 系数容易用方程 (51.22) 和 (51.27) 算出. 包含 $\mathscr{G}(12)\mathscr{G}(1'2')$ 的第一项正是积 $-\langle\hat{j}^0_k(\mathbf{x})\rangle\langle\hat{j}^0_l(\mathbf{x})\rangle$. 简单的计算表明它恒为零，证实前面关于零场中没有超导电流的论断. 我们得到

$$\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{q},\nu_n)=2\left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_1}\left(\mathbf{p}+\frac{1}{2}\mathbf{q}\right)_k\times\left(\mathbf{p}+\frac{1}{2}\mathbf{q}\right)_l[\mathscr{G}(\mathbf{p}+\mathbf{q},\omega_1+\nu_n)\mathscr{G}(p,\omega_1)+\mathscr{F}(\mathbf{p}+\mathbf{q},\omega_1+\nu_n)\mathscr{F}(\mathbf{p},\omega_1)]. \qquad (52.25)$$

这里 $\mathscr{G}(\mathbf{p},\omega_1)$ 和 $\mathscr{F}(\mathbf{p},\omega_1)$ 是方程 (51.30) 和 (51.31) 中给出的；既然它们只依赖于 $|\mathbf{p}|$，在方程 (52.25) 中的变数变换 $[\mathbf{p}\to-\mathbf{p}-\mathbf{q},\ \omega_1\to\omega_1-\nu_n]$ 表明 $\mathscr{D}_{kl}$ 是 ν_n 的偶函数，正如在方程 (30.18) 中那样：

$$\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{q},\nu_n)=\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{q},-\nu_n). \qquad (52.26)$$

频率求和的计算是冗长的，但并不困难，因为方程 (51.32) 中的分项分式表示使各种各样的项归结为方程 (30.8) 中所研究的形式. 因此，只叙述最后结果

$$\mathscr{D}_{kl}(\mathbf{q},\nu_n)=\left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}p_kp_l\left\{(u_+u_-+v_+v_-)^2\times[f(E_+)-f(E_-)]\left[\frac{1}{i\nu_n-\hbar^{-1}(E_--E_+)}\right.\right.$$

$$-\frac{1}{i\nu_n+\hbar^{-1}(E_--E_+)}\Big]+(u_+v_--v_+u_-)^2$$

$$\times[1-f(E_+)-f(E_-)]\Big[\frac{1}{i\nu_n-\hbar^{-1}(E_++E_-)}$$

$$-\frac{1}{i\nu_n+\hbar^{-1}(E_++E_-)}\Big]\Big\}, \tag{52.27}$$

其中已明显表明对 ν_n 的对称性，$\mathbf{p}$ 已换为 $\mathbf{p}-\frac{1}{2}\mathbf{q}$. 这里下标±表示宗量 $\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}\mathbf{q}$(就是说，$E_\pm=E_{\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}\mathbf{q}}$，等)，而

$$f(E)\equiv(e^{\beta E}+1)^{-1}=\frac{1}{2}\left[1-\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right)\right] \tag{52.28}$$

是修订的 Fermi 函数. 注意，即使在 $\Delta\to 0$ 的极限(正常金属)，$f(E)$ 也不同于通常的分布函数，因为 E 这时成为 $|\xi|=|\varepsilon-\mu|$. 方程(52.27)现在是正规谱型，而 $P^{\mathrm{R}}_{kl}(\mathbf{q},\omega)$ 是从代换 $i\nu_n\to\omega+i\eta$ 得出的. 包含 u 和 v 的因子可用方程(51.34)算出，因此得到积分核[方程(52.15)]的 Fourier 变换

$$K_{kl}(\mathbf{q},\omega)=\frac{4\pi ne^2}{mc^2}\delta_{kl}+4\pi\left(\frac{e\hbar}{mc}\right)^2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}p_kp_l$$

$$\times\Big\{\frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\right)[f(E_+)-f(E_-)]$$

$$\times\Big[\frac{1}{\hbar\omega+i\eta-(E_--E_+)}$$

$$-\frac{1}{\hbar\omega+i\eta+(E_--E_+)}\Big]$$

$$+\frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\right)[1-f(E_+)-f(E_-)]$$

$$\times\Big[\frac{1}{\hbar\omega+i\eta-(E_++E_-)}$$

$$-\frac{1}{\hbar\omega+i\eta+(E_++E_-)}\Big]\Big\}, \qquad (52.29)$$

这描写均匀超导电体在温度 T 下对弱的外加(横向)矢量势 $\mathbf{A}$ 的一般响应，

$$j_k(\mathbf{q},\omega)=-\frac{c}{4\pi}K_{kl}(\mathbf{q},\omega)A_l(\mathbf{q},\omega). \qquad (52.30)$$

不幸，这个式子是复杂而臃肿的，我们今后只考虑静态场 ($\omega=0$). 如下面所看到，即使这个较简单的情况也导至相当长的计算，而推广到有限频率并不涉及任何新的原则性问题.

Meissner 效应

现在可以考察 $K(q,0)$ 于 $q\to 0$ 的极限行为 [比较方程 (49.45)] 以揭示 Meissner 效应. 最方便的是计算感生超导电流本身

$$\mathbf{j}(\mathbf{q})=-\frac{ne^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{q})-\frac{1}{c}\left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\mathbf{p}[\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q})]$$
$$\times\left[\left(1+\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\right)\frac{f(E_+)-f(E_-)}{E_+-E_-}\right.$$
$$\left.-\left(1-\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\right)\frac{1-f(E_+)-f(E_-)}{E_++E_-}\right]. \qquad (52.31)$$

在小 q 的极限下，方括号中的量的极限为

$$2\frac{f(E_+)-f(E_-)}{E_+-E_-}\approx 2\frac{\partial f(E_p)}{\partial E_p},$$

我们求得

$$\mathbf{j}(\mathbf{q})\approx-\frac{ne^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{q})-\frac{2}{c}\left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2$$
$$\times\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\mathbf{p}[\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{q})]\frac{\partial f(E_p)}{\partial E_p}$$

$$= -\mathbf{A}(\mathbf{q})\frac{ne^2}{mc}\left[1+\frac{\hbar^2}{3\pi^2 mn}\int_0^\infty dpp^4\frac{\partial f(E_p)}{\partial E_p}\right]$$

$$= -\mathbf{A}(\mathbf{q})\frac{n_s(T)e^2}{mc} \quad (q\to 0). \tag{52.32}$$

这里

$$n_s(T)\equiv n-\frac{\hbar^2}{3\pi^2 m}\int_0^\infty p^4 dp\left[-\frac{\partial f(E_p)}{\partial E_p}\right] \tag{52.33}$$

是 BCS 理论中超导电子密度的定义[1]. 它的极限行为容易用第 51 节所发展的技巧来决定:

$$\frac{n_s(T)}{n}\approx\begin{cases}1-\left(\dfrac{2\pi\Delta_0}{k_BT}\right)^{\frac{1}{2}}e^{-\Delta_0/k_BT} & (T\to 0), \quad (52.34\,a)\\ 2\left(1-\dfrac{T}{T_c}\right) & (T\to T_c), \quad (52.34b)\end{cases}$$

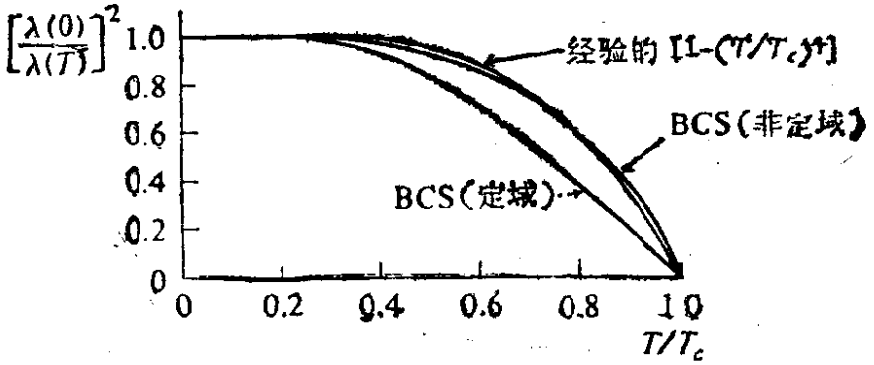


图 52.1 纯超导电体的穿透深度对温度的依赖关系. 曲线 BCS (定域) 和 BCS (非定域)分别按方程 (52.33) 和(52.44) 描绘，利用了 B. Mühlschlegel 计算的表，*Z. Physik*, **155**: 313 (1959). 注意标有 "BCS (定域)"和"经验的"曲线也代表相应的比$n_s(T)/n$ [方程(49.15)和(52.35)].

---

1) BCS 单粒子激发谱具有间隙 Δ. 如第 54 节所表明，简单的准粒子模型这时给出方程 (52.33)，并且确定了破坏超电流的临界速度 $v_c\simeq\Delta/\hbar k_F$. 但是，这种无摩擦流动的解释必须小心使用，因为存在着无能隙的超导电体，它具有有限的有序参数但在激发谱中没有间隙 [A. A. Abrikosov and L. P. Gorkov, *Sov. Phys.-JETP*, **12**: 1243 (1963); M. A Wolf and F. Reif, *Phys. Rev.*, **137A**: 557 (1965)]，而绝缘晶体却也在激发谱中有间隙. 当然，正确的步骤是，提出一个物理问题，比如对横向矢量势的线性响应之类.

而完整的函数示于图 52.1，图中还有方程(49.15)中的经验函数. 既然方程 (52.32) 的形式与 London 理论的形式 [方程(49.29)] 一致，立刻可以作出结论，纯的 London (定域)超导电体的穿透深度由下式给出

$$\left[\frac{\lambda(T)}{\lambda(0)}\right]^2=\left[\frac{\lambda(T)}{\lambda_L(0)}\right]^2=\frac{n}{n_s(T)}\quad\text{(定域极限)},\tag{52.35}$$

这里微观理论的唯一效果是在右边利用了方程(52.33). 注意 $n_s(T)$ 是通过对长波微扰的响应强度来定义的，并且当 $T\to 0$ 时成为总密度 n.

Pippard (非定域)极限的穿透深度

电磁效应涉及的波长与穿透深度 $\lambda(T)$ 可比拟，所以前面的极限 $q\xi_0\equiv q(\hbar v_F/\pi\Delta_0)\ll 1$ 可解释为描写 London (定域)超导电体的行为. 现在，在相反的极限 $q\xi_0\gg 1$ 下计算积分核，它将使我们可以决定纯 Pippard 超导电体的穿透深度. 除了上面的限制以外，q 还必须满足条件 $q\ll k_F$，因为穿透深度总是远远大于原子间距.

以 $\hat{q}$ 作为球极坐标的极轴，用这坐标系计算方程 (52.29) 是方便的. London 规范把 $\mathbf{p}$ 限制于赤道平面，方位积分表明 $\mathbf{j}$ 取方程 (49.39) 的形式，其中

$$\begin{aligned}K(|\mathbf{q}|,0)\equiv K(q)=&\frac{4\pi ne^2}{mc^2}+\frac{4\pi e^2\hbar^2}{m^2c^2}\int_0^\infty\frac{dp}{(2\pi)^2}\\&\times\frac{p^4}{2}\int_0^\pi\sin^3\theta d\theta\\&\times\left[\left(1+\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\right)\frac{f(E_+)-f(E_-)}{E_+-E_-}\right.\\&\left.-\left(1-\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\right)\frac{1-f(E_+)-f(E_-)}{E_++E_-}\right].\end{aligned}\tag{52.36}$$

这式子可用方程(51.29)，(52.28)和(3.29)改写成

$$K(q)=\frac{4\pi ne^2}{mc^2}\Big\{1-\frac{3}{16}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\int_{-1}^{1}dz(1-z^2)\times\Big[\Big(1+\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\Big)\times\frac{\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta E_+\Big)-\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta E_-\Big)}{E_+-E_-}+\Big(1-\frac{\xi_+\xi_-+\Delta^2}{E_+E_-}\Big)\times\frac{\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta E_+\Big)+\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta E_-\Big)}{E_++E_-}\Big]\Big\},\tag{52.37}$$

这里

$$\xi_\pm=\xi\pm\frac{1}{2}\hbar qv_Fz,\tag{52.38}$$

忽略了数量级为 q^2/k_F^2 的项.

先考虑正常态的响应，这可在方程(52.37)中令 $\Delta=0$ 与 $E_\pm=|\xi_\pm|$ 而得出.对 ξ_+ 和 ξ_-的各种可能符号加以考察，可得出简单的形式

$$K_n(q)=\frac{4\pi ne^2}{mc^2}\Big[1-\frac{3}{8}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\int_{-1}^{1}dz(1-z^2)\times\frac{\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta\xi_+\Big)-\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta\xi_-\Big)}{\xi_+-\xi_-}\Big]$$

$$=\frac{4\pi ne^2}{mc^2}\Big[1-\frac{3}{8}\int_{-1}^{1}dz(1-z^2)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\times\frac{\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta\xi_+\Big)-\tanh\Big(\frac{1}{2}\beta\xi_-\Big)}{\hbar qv_Fz}\Big].$$

对 ξ 积分可严格算出，它给出

$$K_n(q)=\frac{4\pi ne^2}{mc^2}\left[1-\frac{3}{4}\int_{-1}^{1}dz(1-z^2)\right]=0. \quad (52.39)$$

这结果对一切 $q \ll k_F$ 都成立，从而证实正常态是非磁性的，只可能有弱的 Pauli 顺磁性和 London 逆磁性，而这两者在当前的近似中都已略去.（见习题 13.17 和 13.18）

考虑方程 (52.37) 和 (52.39) 的差，可以简化超导电积分核的计算. 把 $\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_{\pm}\right)$ 的因子分别集合，求得[1]

$$\begin{aligned}K(q) &\equiv K(q)-K_n(q)\\ &=-\frac{3\pi ne^2}{4mc^2}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\int_{-1}^{1}dz(1-z^2)\\ &\quad\times\left\{\frac{4\Delta^2}{\xi_+^2-\xi_-^2}\left[\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_+\right)}{E_+}-\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_-\right)}{E_-}\right]\right.\\ &\quad+\frac{2}{\xi_+-\xi_-}\left[\xi_+\left(\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_+\right)}{E_+}-\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\xi_+\right)}{\xi_+}\right)\right.\\ &\quad\left.\left.-\xi_-\left(\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_-\right)}{E_-}-\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\xi_-\right)}{\xi_-}\right)\right]\right\}. \quad (52.40)\end{aligned}$$

既然 $\xi_+-\xi_-=\hbar q v_F z$，(方括号中的)最后一项包含因子

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\left[\frac{\xi_+}{E_+}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_+\right)-\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\xi_+\right)\right] \quad (52.41)$$

以及带有下标 "$-$" 的另外一项. 显然，这积分在 $|\xi|$ 很大时绝对收敛；于是允许把变数从 ξ 改到 ξ_+，而由于被积函数是奇对称的，因而积分为零. 照这方式，方程 (52.40) 变成

1) I. M. Khalatnikov and A. A. Abrikosov, *Advan. Phys.*, **8**: 45(1959).

$$K(q)=-\frac{3\pi ne^2\Delta^2}{2mc^2\hbar qv_F}\int_{-1}^{1}dz\frac{1-z^2}{z}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\xi}{\xi}\left[\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_+\right)}{E_+}-\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_-\right)}{E_-}\right]. \tag{52.41}$$

被积函数的每一项在 $\xi\approx 0$，$z\approx 0$ 的邻近分别发散，而区间 $\xi\approx 0$ 和 $z\approx 0$ 也就在积分中起主要作用.因此，缓变的分子 $(1-z^2)\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_\pm\right)$ 可用它们在 $\xi=0$，$z=0$ 的极限值 $\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\Delta\right)$ 来近似，这给出

$$\begin{aligned}K(q)&\approx-\frac{3\pi ne^2\Delta^2\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\Delta\right)}{2mc^2\hbar qv_F}\int_{-1}^{1}\frac{dz}{z}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\xi}{\xi}\left(\frac{1}{E_+}-\frac{1}{E_-}\right)\\&=-\frac{3\pi ne^2\Delta^2\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\Delta\right)}{mc^2\hbar qv_F}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\zeta}{\zeta}\int_0^{\infty}\frac{d\xi}{\xi}\\&\quad\times\left\{\frac{1}{\left[\left(\xi+\frac{1}{2}\zeta\right)^2+\Delta^2\right]^{\frac{1}{2}}}-\frac{1}{\left[\left(\xi-\frac{1}{2}\zeta\right)^2+\Delta^2\right]^{\frac{1}{2}}}\right\},\end{aligned} \tag{52.42}$$

这里 $\zeta=\hbar qv_Fz$，而条件 $q\xi_0=q\hbar v_F/\pi\Delta_0\gg 1$ 使我们可以把积分限扩张到 $\zeta=\pm\infty$. 剩下的积分容易化为

$$(-4/\Delta)\int_0^{\infty}(\sinh x)^{-1}x\,dx,$$

这容易算出(见附录 A)为 $-\pi^2/\Delta$，而方程 (52.42) 成为

$$K(q)=\frac{3\pi^2}{mc^2}\frac{ne^2}{q\xi_0}\frac{\Delta(T)}{\Delta_0}\tanh\left[\frac{1}{2}\beta\Delta(T)\right], \tag{52.43}$$

这里用了方程(49.33)以指认 ξ_0. 这式子应当与相应的 Pippard 积分核的非定域极限 ($q\xi_0\gg 1$) [方程(49.47)] 相比较. 剩

下来的关于 Pippard 极限下的穿透深度的计算，严格地照前面那样进行，我们求得 ($\lambda \gg \xi_0$)

$$\lambda(T) = \lambda(0)\left[\frac{\Delta(T)}{\Delta_0}\tanh\frac{\Delta(T)}{2k_BT}\right]^{-\frac{1}{3}}, \qquad (52.44)$$

这里

$$\lambda(0) = \frac{8}{9}\left(\frac{\sqrt{3}}{2\pi}\right)^{\frac{1}{3}}[\xi_0\lambda_L^2(0)]^{\frac{1}{3}} \qquad (52.45)$$

是两种理论共同的零温度极限. 注意这里的微观计算预测了在非定域极限下的确定的 λ 与温度的关系 $\lambda(T)$；这函数示于图 52.1，图中还有经验的形式即方程 (49.14)，以及定域极限下的理论预测曲线[方程(52.33)].

非定域积分关系式

作为 Pippard 唯象理论的最终验证，把方程(52.31)变换到坐标空间. 为了简单，计算将限制于 $T = 0$，但同一方法适用于一切 $T < T_c$[1]. 用了变数代换 $\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{q} \to \mathbf{k}$, $\mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{q} \to \mathbf{l}$，逆 Fourier 变换在 $T = 0$ 可写为

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{x}) = &-\frac{ne^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{x}) - \left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2\frac{1}{4c}\int d^3x'\int\frac{d^3k\,d^3l}{(2\pi)^6}\\ &\times(\mathbf{k}+\mathbf{l})[(\mathbf{k}+\mathbf{l})\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}')]\\ &\times e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{l})\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}F(\xi_k,\xi_l),\end{aligned} \qquad (52.46)$$

这里

$$F(\xi,\xi') = \frac{\xi\xi' + \Delta_0^2 - EE'}{EE'(E+E')}, \qquad (52.47)$$

因为当 $T \to 0$ 时 $f(E)$ 变为零.

为把方程(52.46)置于正规形式，集中注意于第二项，它

1) 一般表示式的推导见 J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, 前引文, sec. V and appendix C.

含有积分核

$$S_{ij}(\mathbf{x}) \equiv (2\pi)^{-6}\int d^3k d^3l(\mathbf{k}+\mathbf{l})_i(\mathbf{k}+\mathbf{l})_j \times e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{l})\cdot\mathbf{x}}F(\xi_k,\xi_l). \tag{52.48}$$

算出这式子的最容易的办法是引入推广的积分核

$$S_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{x}') \equiv (2\pi)^{-6}\int d^3k d^3l(\mathbf{k}+\mathbf{l})_i(\mathbf{k}+\mathbf{l})_j \times e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{l})\cdot\mathbf{x}}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{l})\cdot\mathbf{x}'}F(\xi_k,\xi_l),$$

这显然在 $\mathbf{x}'\to 0$ 时趋于 $S_{ij}(\mathbf{x})$. 矢量分量现在可换作对于 $\mathbf{x}'$ 的空间梯度，

$$S_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = -\nabla'_i\nabla'_j(2\pi)^{-6}\int d^3k d^3l e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}'+\mathbf{x})} \times e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}F(\xi_k,\xi_l),$$

角度积分现在是初等的，

$$S_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = -4(2\pi)^{-4}\int_0^\infty k^2dk\int_0^\infty l^2dlF(\xi_k,\xi_l) \times\nabla'_i\nabla'_j j_0(k|\mathbf{x}'+\mathbf{x}|)j_0(l|\mathbf{x}'-\mathbf{x}|),$$

这里 $j_0(z)=(\sin z)/z$. 函数 $F(\xi_k,\xi_l)$ 在 $k\approx l\approx k_F$ 附近有尖锐的峰，而有关的空间距离远大于粒子间距 $\approx k_F^{-1}$. 其后果是三角函数迅速振荡，而在计算导数时，j_0 的分母的变化可以忽略，直截了当的计算给出，

$$S_{ij}(\mathbf{x}) = S_{ij}(\mathbf{x},0) = 8k_F^2\frac{x_ix_j}{x^4}\int_0^\infty\int_0^\infty\frac{kdkldl}{(2\pi)^4}F(\xi_k,\xi_l) \times\cos[(k-l)x].$$

由于积分是收敛的，可以引入积分变数 ξ_k 和 ξ_l，这给出

$$S_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{x_ix_j}{x^4}\frac{m^2k_F^2}{2\pi^4\hbar^4}\int_{-\infty}^\infty\int_{-\infty}^\infty d\xi d\xi' F(\xi,\xi') \times\cos\left[(\xi-\xi')\frac{x}{\hbar v_F}\right].$$

剩下的二重积分可用变数代换算出[1]

1) P. G. deGennes, 前引书, p. 168.

$$\xi = \Delta_0 \sinh(\tau + \tau'), \qquad \xi' = \Delta_0 \sinh(\tau - \tau'),$$

经过一些简单的代数运算可得，

$$S_{ij}(\mathbf{x}) = -\frac{2\Delta_0 x_i x_j}{x^4} \frac{m^2 k_F^2}{2\pi^4 \hbar^4} \times \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau d\tau' \cos[(2\Delta_0 x/\hbar v_F)\sinh\tau' \cosh\tau] \sinh^2\tau'}{\cosh\tau \cosh\tau'}.$$

用代换 $z = \sinh\tau'$ 容易进行 τ' 积分

$$S_{ij}(\mathbf{x}) = -\frac{\Delta_0 m^2 k_F^2}{\pi^4 \hbar^4} \frac{x_i x_j}{x^4} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{\cosh\tau} \times \left[2\pi\delta\left(\frac{2\Delta_0 x \cosh\tau}{\hbar v_F}\right) - \pi \exp\frac{-2\Delta_0 x \cosh\tau}{\hbar v_F}\right],$$

而剩下的式子可改写为

$$S_{ij}(\mathbf{x}) = \left(\frac{m k_F}{\pi^2 \hbar^2}\right)^2 \frac{x_i x_j}{x^4} [-2\pi\hbar v_F \delta(x) + \pi^2 \Delta_0 J(x)]. \quad (52.49)$$

这里的函数 $J(x)$ 定义为

$$J(x) \equiv \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} d\tau \,\mathrm{sech}\,\tau \exp\left(-\frac{2\Delta_0 x \cosh\tau}{\hbar v_F}\right) = \frac{2}{\pi}\int_{2\Delta_0 x/\hbar v_F}^{\infty} d\zeta K_0(\zeta), \quad (52.50)$$

而 $K_0(\zeta)$ 是附录 A 所定义的虚宗量 Bessel 函数. 方程(52.49)代入方程 (52.46) 表明，一维 δ 函数严格地消去方程 (52.46)的第一项[1]，最后得到

$$j(\mathbf{x}) = -\frac{3ne^2}{4\pi mc} \frac{\pi\Delta_0}{\hbar v_F} \int d^3x' \frac{\mathbf{X}[\mathbf{X}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{x}')]J(X)}{X^4}, \quad (52.51)$$

这里 $\mathbf{X} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$. 这式子形式上全同于纯超导电体 ($r_0 = \xi_0$) 在 $T = 0$ 的 Pippard 方程(49.31)，只是用 $J(x)$ 代替了 e^{-X/ξ_0}. 容易看出，对于一切 X，$J(X)$ 与 Pippard 积分核很相似(图 52.2)，特定地说，

1) 注意 $\int_0^{\infty} \delta(x)dx = \frac{1}{2}$.

$$J(0) = 1,$$
$$\int_0^\infty dX J(X) = \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta_0},$$

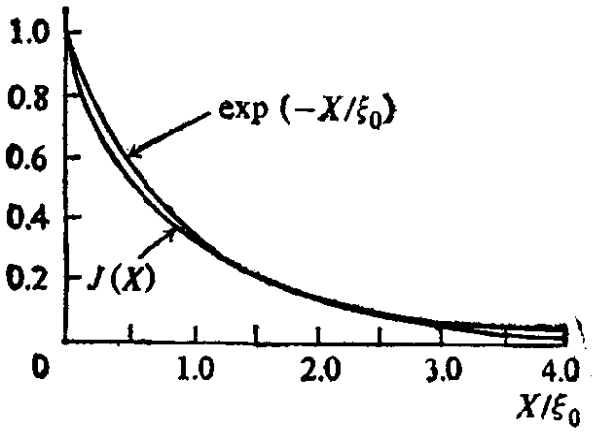


图 52.2 纯超导电体在零温度下的 BCS 核 (52.50) 与 Pippard 核 e^{-X/ξ_0} 的比较.

这使得可以将 Pippard 相干长度用微观理论的参数表出

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta_0}. \tag{52.52}$$

上面的微观计算已扩展到有限的温度和频率，并推广到具有有限平均自由程的合金.在一切情况下,所得的超导电流都可赋予 Pippard 原始的式子的形式，从而详尽地证明早期唯象理论是合理的[1].

53. Ginzburg-Landau 方程的微观推导

微观理论要求错综而精致的自洽条件，因而直接用于研究空间不均匀系统很困难.作为鲜明的对照，Ginzburg-Landau 理论容易应用于非均匀超导电体，这也许是它独特的最重要

1) D. C. Mattis and J. Bardeen, *Phys. Rev.*, **111**: 412 (1958); A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinskii, 前引书, secs. 37 and 39; G. Rickayzen, 前引书, chap. 7; J. R. Schrieffer, 前引书, sec. 8.4.

特点．它的简单性在于它的微分结构可以充分利用单体 Schrödinger 方程作为类比．如第 50 节中所讨论的，原来的 Ginzburg-Landau 方程纯粹是唯象的，各个常数由实验确定．作为本章最后一个论题，现在提出 Gorkov 关于 Ginzburg-Landau 方程的微观推导[1]．这个计算直接用微观参数决定唯象常数；它还澄清了方程的适用范围，并可以直接扩展到超导电合金之类的复杂系统．确实，现在许多微观计算是用推导近似的 Ginzburg-Landau 方程来进行的，这些方程的求解，比原来的方程简单很多．

我们从 $\mathscr{G}$ 和 $\mathscr{F}^\dagger$ 这一对耦合方程 (51.23) 出发．这里重要的是任意的磁场（不像第 52 节）的效应，所以 $\mathbf{A}$ 不能看作小量．相反，我们便计算限制于 T_c 的紧邻，这里能隙函数 $\Delta(\mathbf{x})$ 本身提供了必需的小参数 $|\Delta(\mathbf{x})/k_B T_c| \ll 1$．引入新的温度 Green 函数 $\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n)$ 是方便的，这函数描写同一磁场中的正常态．它满足方程

$$\begin{cases} \left\{ i\hbar\omega_n + \dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla + \dfrac{ie\mathbf{A}(\mathbf{x})}{\hbar c}\right]^2 + \mu \right\} \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) \\ \qquad = \hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \left\{ i\hbar\omega_n + \dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla - \dfrac{ie\mathbf{A}(\mathbf{x})}{\hbar c}\right]^2 + \mu \right\} \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \omega_n) \\ \qquad = \hbar\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \end{cases} \tag{53.1}$$

这两个方程是从方程(51.23 a)以及与 $\Delta = 0$ 的 $\mathscr{G}(\mathbf{x}', \mathbf{x}, \omega_n)$ 作类比得来的．有了这个辅助函数，就可以将方程 (51.23)改写为下列一对耦合积分方程

$$\mathscr{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) - \hbar^{-1} \int d^3y \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega_n)\Delta(\mathbf{y})$$

1) L. P. Gorkov, *Sov. Phys.-JETP*, **9**: 1364 (1959); A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinskii, 前引书, sec. 38.

$$\times \mathscr{F}^{\dagger}(\mathbf{y},\mathbf{x}',\omega_n), \tag{53.2 a}$$

$$\mathscr{F}^{\dagger}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) = \hbar^{-1}\int d^3y \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},-\omega_n) \times \Delta^*(\mathbf{y})\mathscr{G}(\mathbf{y},\mathbf{x}',\omega_n), \tag{53.2 b}$$

这容易用直接代入原来的微分方程来验证. 小心注意方程(53.2 b)中相当复杂的宗量，他们是重现方程(51.23 b)的结构所必需的. 对方程(53.2)作简单运算给出，

$$\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) = \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) - \hbar^{-2}\int d^3y d^3z \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x},\mathbf{y},\omega_n)\Delta(\mathbf{y}) \times \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{z},\mathbf{y},-\omega_n)\Delta^*(\mathbf{z}) \times \mathscr{G}(\mathbf{z},\mathbf{x}',\omega_n), \tag{53.3 a}$$

$$\mathscr{F}^{\dagger}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) = \hbar^{-1}\int d^3y \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},-\omega_n) \times \Delta^*(\mathbf{y})\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x}',\omega_n) - \hbar^{-2}\int d^3y d^3z \times \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},-\omega_n) \times \Delta^*(\mathbf{y})\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{z},\omega_n)\Delta(\mathbf{z}) \times \mathscr{F}^{\dagger}(\mathbf{z},\mathbf{x}',\omega_n), \tag{53.3 b}$$

这些分别是 $\mathscr{G}$ 和 $\mathscr{F}^{\dagger}$ 的严格的积分方程.

要进一步讨论，就需要假定 Δ 很小. 先集中注意于方程(53.3 b). 在这极限下，右边第二项成为小的扰动，展开结果

$$\mathscr{F}^{\dagger}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) = \hbar^{-1}\int d^3y \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},-\omega_n)\Delta^*(\mathbf{y})\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x}',\omega_n) - \hbar^3\int d^3y d^3z d^3w \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},-\omega_n)\Delta^*(\mathbf{y}) \times \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{z},\omega_n)\Delta(\mathbf{z})\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{w},\mathbf{z},-\omega_n) \times \Delta^*(\mathbf{w})\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{w},\mathbf{x}',\omega_n) + \cdots. \tag{53.4}$$

从方程(53.4)与自洽能隙条件(51.24)，我们得到能隙函数本身的积分方程

$$g^{-1}\Delta^*(\mathbf{x}) = \int d^3y\, Q(\mathbf{x},\mathbf{y})\Delta^*(\mathbf{y}) + \int d^3y d^3z d^3w R(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z},\mathbf{w}) \times \Delta^*(\mathbf{y})\Delta(\mathbf{z})\Delta^*(\mathbf{w}), \quad (53.5)$$

高级项已略去. 这里的核包含 $\tilde{\mathcal{G}}^0$，从而只取决于正常金属的性质

$$Q(\mathbf{x},\mathbf{y}) \equiv (\beta\hbar^2)^{-1}\sum_n \tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},-\omega_n)\tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},\omega_n), \quad (53.6)$$

$$R(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z},\mathbf{w}) \equiv -(\beta\hbar^4)^{-1}\sum_n \tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{x},-\omega_n)\tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{y},\mathbf{z},\omega_n) \times \tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{w},\mathbf{z},-\omega_n)\tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{w},\mathbf{x},\omega_n). \quad (53.7)$$

我们看到，$|\Delta|$很小的假定只能导致非线性积分方程，Ginzburg Landau 方程的较为简单的微分结构还需要另加一个独立的假定，$T_c - T \ll T_c$，既然 Δ^* 和 $\mathbf{A}$ 这时在核 Q 和 R 的范围内变化缓慢. 这两个条件在物理上是十分不同的，充分强的磁场就能使 Δ^* 很小，甚至在 $T = 0$ 时也如此.

现在必须考察核 Q 和 R. 作为第一步，计算无磁场的正常态 Green 函数 $\mathcal{G}^0$. 这函数只依赖于 $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$，精确地是第 23 节所研究过的

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{x},\omega_n) = \hbar(2\pi)^{-3}\int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}(i\hbar\omega_n - \xi_k)^{-1}. \quad (53.8)$$

虽然它在空间中的全部变化关系相当复杂，但是，方程 (53.5) 到 (53.7) 中的有关长度全都远大于原子间尺寸，所以可以假定 $k_F x \gg 1$. 此外，如分立的频率满足限制条件 $|\hbar\omega_n| \ll \mu$，则主要的贡献来自 Fermi 面的邻近，我们求得

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{x},\omega_n) \approx \hbar N(0)\int \frac{d\xi}{i\hbar\omega_n - \xi} j_0(kx) \approx \frac{\hbar N(0)}{2ik_F x}\int \frac{d\xi}{i\hbar\omega_n - \xi}\left\{\exp\left[i\left(k_F + \frac{\xi}{\hbar v_F}\right)x\right]\right.$$

$$- \exp\left[-i\left(k_F + \frac{\xi}{\hbar v_F}\right)x\right]\Big\}$$

$$= -\frac{\pi\hbar N(0)}{k_F x}\exp\left(ik_F x\,\mathrm{sgn}\omega_n - \frac{x|\omega_n|}{v_F}\right). \qquad (53.9)$$

最后这个限制条件 $|\hbar\omega_n| \ll \mu$，在实际中已证明是完全合理的，因为略去的项，在方程 (53.6) 与 (53.7) 中遍及 n 的求和中，只作出可忽略的贡献.

方程 (53.1) 中的磁场是超导电态的磁场，它在自然的长度 $\lambda(T)$ 上变化. 与此相反，$\mathscr{G}^0$ 以小得多的长度 k_F^{-1} 振荡，所以 $\mathbf{A}$ 可在许多波长上局部地当作常数. Gorkov 于是作了程函(相积分)近似，假定磁场的主要效应可包含于缓慢变化的包络函数 φ

$$\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = e^{i\varphi(x,x')}\mathscr{G}^0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \omega_n). \qquad (53.10)$$

对于 $\mathbf{x} \approx \mathbf{x}'$，$\mathbf{A}$ 的贡献可忽略；所以选取 φ 满足

$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0. \qquad (53.11)$$

用方程 (53.10) 直接计算给出

$$\left(\nabla + \frac{ie\mathbf{A}}{\hbar c}\right)^2\tilde{\mathscr{G}}^0 = e^{i\varphi}\Big\{\nabla^2\mathscr{G}^0 + 2i\left(\nabla\varphi + \frac{e\mathbf{A}}{\hbar c}\right)\cdot\nabla\mathscr{G}^0$$

$$+ \left[i\nabla^2\varphi + \frac{ie(\nabla\cdot\mathbf{A})}{\hbar c} - \left(\nabla\varphi + \frac{e\mathbf{A}}{\hbar c}\right)^2\right]\mathscr{G}^0\Big\}. \qquad (53.12)$$

因为 $\mathscr{G}^0$ 的变化的特征长度为 k_F^{-1}，所以方程 (53.12) 的项大致是按 $eA/\hbar ck_F$ 的升幂分组的. 既然 A 为 λH 的数量级，这个参数可改写为 $\lambda eH/\hbar ck_F$，就一切有关的磁场来说，这参数是小量. 其后果是，我们完全忽略方程 (53.12) 的最后一项，而决定 φ 的条件为，

$$\left[\nabla\varphi(\mathbf{x},\mathbf{x}') + \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{\hbar c}\right]\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = 0. \qquad (53.13)$$

给定 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$，这个一阶微分方程总是可以积分的.

现在转到核 $Q(\mathbf{x},\mathbf{y})$. 方程 (53.6) 和 (53.10) 结合给出

$$Q(\mathbf{x},\mathbf{y}) = (\beta\hbar^2)^{-1}\sum_n e^{2i\varphi(\mathbf{y},\mathbf{x})}\mathcal{G}^0(\mathbf{y}-\mathbf{x},-\omega_n)\mathcal{G}^0(\mathbf{y}-\mathbf{x},\omega_n)$$

$$\equiv e^{2i\varphi(\mathbf{y},\mathbf{x})}Q^0(\mathbf{x}-\mathbf{y}), \tag{53.14}$$

这给出无磁场时的核 Q^0 的定义. 这个函数用方程 (53.9) 和关系式 $\sum_n f(|\omega_n|) = 2\sum_{n=0}^{\infty} f(\omega_n)$ 容易算出:

$$Q^0(\mathbf{x}) = \left[\frac{\pi N(0)}{k_F x}\right]^2 \frac{1}{\beta}\sum_n \exp\left[-\frac{2x|\omega_n|}{v_F}\right]$$

$$= \left[\frac{\pi N(0)}{k_F x}\right]^2 \frac{1}{\beta\sinh(2\pi x/\beta\hbar v_F)}. \tag{53.15}$$

靠近 T_c 时，如 $x \gg \hbar v_F/k_B T_c \approx O(\xi_0)$，则核 Q^0 指数式地变为零，这样它的作用范围与（温度无关的）Pippard 相干长度差不多. 既然 ξ_0 或者是远小于矢量势的变化尺度，或者是远小于能隙函数的变化尺度，可以把 $\mathbf{A}$ 和 Δ^* 当作缓慢变化的函数. 具体讲，方程 (53.13) 可以求积分得出

$$\varphi(\mathbf{x},\mathbf{x}') = -\frac{e}{2\hbar c}[\mathbf{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x}')]\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \tag{53.16}$$

这种对称形式是方程 (53.1) 的两种形式之间的折衷. 此外，$\mathbf{A}$ 的数量级为 $H_c(T)\lambda(T)\propto(T_c-T)^{\frac{1}{2}}$；这样，$Q^0$ 作用范围受到限制就是说 $\varphi(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 本身在 $T\to T_c$ 时变成小量，使得 $e^{i\varphi}$ 可以按 φ 的幂展开.

有了上面的条件，我们就可以计算方程 (53.5) 右边第一项. 用定义 $\mathbf{z}\equiv\mathbf{y}-\mathbf{x}$ 可得到

$$\int d^3y\, Q(\mathbf{x},\mathbf{y})\Delta^*(\mathbf{y})$$

$$= \int d^3z\, Q^0(z)\exp\left\{-\frac{ie}{\hbar c}[\mathbf{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x}+\mathbf{z})]\cdot\mathbf{z}\right\}$$

$$\times\Delta^*(\mathbf{x}+\mathbf{z})$$

$$= \int d^3z Q^0(z)\left\{1 - \frac{ie}{\hbar c}[\mathbf{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x}+\mathbf{z})]\cdot\mathbf{z}\right.$$

$$\left. - \frac{1}{2}\left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2\{[\mathbf{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x}+\mathbf{z})]\cdot\mathbf{z}\}^2 + \cdots\right\}$$

$$\times \Delta^*(\mathbf{x}+\mathbf{z}). \tag{53.17}$$

Q^0 是短程的，这要求 $z \lesssim \xi_0$，剩下的函数可在 $z = 0$ 附近展为 Taylor 级数. 保留首位的改正项，求得

$$\int d^3y Q(\mathbf{x},\mathbf{y})\Delta^*(\mathbf{y})$$

$$\approx \Delta^*(\mathbf{x})\int d^3z Q^0(z) + \frac{1}{6}\left[\nabla - \frac{2ie\mathbf{A}(\mathbf{x})}{\hbar c}\right]^2\Delta^*(\mathbf{x})$$

$$\times \int d^3z z^2 Q^0(z). \tag{53.18}$$

这里 ∇ 表示对 $\mathbf{x}$ 求梯度，只作用于矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ 和能隙函数 $\boldsymbol{\Delta}^*(\mathbf{x})$. 注意现在已把原来的积分算符化为较简单的微分算符.

正常金属的性质只出现于方程(53.18)的数字系数中，我们先考虑 $\int d^3z Q^0(z)$，它在原点作对数式发散. 这个奇异性反映了方程(51.1)中短程势近似是不实际的. 因此，它必须在动量空间中截断于 $|\xi| = \hbar\omega_D$:

$$\int d^3z Q^0(z) = (\beta\hbar^2)^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3k \sum_n \mathcal{G}^0(\mathbf{k},\omega_n)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-\omega_n)$$

$$= \beta^{-1}(2\pi)^{-3}\int d^3k \sum_n (\hbar^2\omega_n^2 + \xi_k^2)^{-1}$$

$$= N(0)\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi\xi^{-1}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\xi\right).$$

这积分正是方程(51.39)中考虑过的，与方程(51.42)和(51.43)比较，可给出

$$\int d^3z Q^0(z) = N(0)\ln(2\hbar\omega_D\beta e^{\gamma}\pi^{-1})$$
$$= N(0)\ln\left(\frac{T_c}{T}\right) + g^{-1}$$
$$\approx N(0)\left(1 - \frac{T}{T_c}\right) + g^{-1}. \qquad (53.19)$$

方程(53.18)中的另一积分可用方程(53.15)直接在坐标空间算出. 既然这一项已经是小改正项的系数,可令 $T = T_c$ 而得到

$$\int d^3z z^2 Q^0(z) \approx \frac{1}{\beta_c}\left[\frac{\pi N(0)}{k_F}\right]^2 \int d^3z \,\mathrm{csch}\,\frac{2\pi z}{\beta_c\hbar v_F}$$
$$= \frac{1}{4}N(0)\left(\frac{\beta_c\hbar v_F}{\pi}\right)^2 \int_0^\infty dy \frac{y^2}{\sinh y}$$
$$= \frac{7\zeta(3)}{8}N(0)\left(\frac{\hbar v_F}{\pi k_B T_c}\right)^2, \qquad (53.20)$$

其中曾用到方程(51.38).

现在只需计算方程(53.5)中小的非线性改正,置 $\tilde{\mathcal{G}}^0 \approx \mathcal{G}^0$ 并把所有的Δ因子取在同一点,就可在最低级中算出这改正,

$$\int d^3y d^3z d^3w R(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z},\mathbf{w})\Delta^*(\mathbf{y})\Delta(\mathbf{z})\Delta^*(\mathbf{w})$$
$$\approx \Delta^*(\mathbf{x})|\Delta(\mathbf{x})|^2 \int d^3y d^3z d^3w R(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z},\mathbf{w}).$$

在动量空间中的直截了当的计算给出

$$\int d^3y d^3z d^3w R(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z},\mathbf{w})$$
$$= -\beta_c^{-1}\sum_n (2\pi)^{-3}\int d^3k(\hbar^2\omega_n^2 + \xi_k^2)^{-2}$$
$$= -\frac{\pi N(0)}{2\beta_c}\sum_n |\hbar\omega_n|^{-3}$$
$$= -N(0)\frac{7\zeta(3)}{8}(\pi k_B T_c)^{-2}, \qquad (53.21)$$

这里又已令 T 等于 T_c.

把方程 (53.5)，(53.18) 和 (53.19) 到 (53.21) 结合起来，得到 $\Delta^*(\mathbf{x})$ 的最终方程. 经某些调整，项 $g^{-1}\Delta^*(\mathbf{x})$ 恒等地消去，我们求得

$$\frac{\hbar^2}{4m}\left[\nabla-\frac{2ie\mathbf{A}(\mathbf{x})}{\hbar c}\right]^2\Delta^*(\mathbf{x})+\frac{6\pi^2(k_BT_c)^2}{7\zeta(3)\epsilon_F^0}$$

$$\times\left[\frac{T_c-T}{T_c}\Delta^*(\mathbf{x})-\frac{7\zeta(3)\Delta^*(\mathbf{x})|\Delta(\mathbf{x})|^2}{8(\pi k_BT_c)^2}\right]=0. \quad (53.22)$$

定义波函数如下，

$$\Psi(\mathbf{x})\equiv\left[\frac{7\zeta(3)n}{8(\pi k_BT_c)^2}\right]^{\frac{1}{2}}\Delta(\mathbf{x})$$

$$=\left[\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2}\right]^{\frac{1}{2}}\frac{\Delta(\mathbf{x})}{k_BT_c}n^{\frac{1}{2}}, \quad (53.23)$$

可使它与 Ginzburg-Landau 方程的关系成为显式，这 $\Psi(\mathbf{x})$ 满足下列方程(注意复数共轭)

$$\frac{1}{4m}\left[-i\hbar\nabla+\frac{2e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c}\right]^2\Psi(\mathbf{x})+\frac{6\pi^2(k_BT_c)^2}{7\zeta(3)\epsilon_F^0}$$

$$\times\left[-\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\Psi(\mathbf{x})+n^{-1}\Psi(\mathbf{x})|\Psi(\mathbf{x})|^2\right]=0. \quad (53.24)$$

这里 n 是总电子密度，与方程 (50.7 a) 的比较可得出唯象参数为

$$\begin{cases} m^*=2m, & e^*=2e, \\ a=-\dfrac{6\pi^2(k_BT_c)^2}{7\zeta(3)\epsilon_F^0}\left(1-\dfrac{T}{T_c}\right), & b=\dfrac{6\pi^2(k_BT_c)^2}{7\zeta(3)\epsilon_F^0n}. \end{cases} \quad (53.25)$$

还有，特征长度 $\lambda(T)$ 和 $\xi(T)$ 可用微观参数 $\lambda_L(0)$ 和 ξ_0 算出[方程 (50.18) 和 (50.22)]，

$$\lambda(T)=\frac{1}{\sqrt{2}}\lambda_L(0)\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{-\frac{1}{2}}\ (T\to T_c), \quad (53.26\,a)$$

$$\xi(T) = \xi_0 \pi e^{-\gamma}\left[\frac{7\zeta(3)}{48}\right]^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$\approx 0.739\xi_0\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (T \to T_c), \quad (53.26\,\mathrm{b})$$

而 Ginzburg-Landau 参数成为

$$k \equiv \frac{\lambda(T)}{\xi(T)} \approx 0.957\,\frac{\lambda_L(0)}{\xi_0} \quad (T \to T_c). \qquad (53.27)$$

所得的穿透深度，符合于从靠近 T_c 的弱场响应得出的穿透深度 [比较方程 (52.34 b) 和 (52.35)]，但必须计及能隙函数的空间变化才能确定相干长度. 此外，从方程 (50.12)，(50.16) 和 (50.25) 导出的 $n_s(T) = 2n_s^*(T)$ 和 $H_c(T)$ 的 Ginzburg-Landau 表示式符合于方程 (52.34b) 和 (51.64). 最后这个计算需要下式

$$[H_c(0)]^2 = \frac{3\pi^3(k_B T_c)^2 n e^{-2\gamma}}{\epsilon_F^0},$$

这是把方程(51.38)，(51.44)和(51.56)结合起来而得出的.

前面的推导表明，第一个 Ginzburg-Landau 方程表现为自洽能隙方程在 T_c 附近的展开. 现在考虑超导电流，它可联系于单粒子 Green 函数 $\mathcal{G}$ 的空间导数[比较方程 (52.10)]，

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{e\hbar}{m i}(\nabla - \nabla')\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau^+)|_{\mathbf{x}'=\mathbf{x}}$$

$$- 2\,\frac{e^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}\tau^+). \qquad (53.28)$$

这里因子 2 是从自旋求和而来. 如果把方程 (53.3 a) 展开为

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = \tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) + \delta\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n),$$

其中

$$\delta\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) =$$

$$-\hbar^{-2}\int d^3y d^3z \tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega_n)\tilde{\mathcal{G}}^0(\mathbf{z}, \mathbf{y}, -\omega_n)$$

$$\times \tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{z},\mathbf{x}',\omega_n)\Delta(\mathbf{y})\Delta^*(\mathbf{z}), \qquad (53.29)$$

则用方程(53.10)和(53.16)进行的简单计算表明零级贡献为零，

$$-\frac{e\hbar}{mi}(\nabla-\nabla')\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau^+)|_{\mathbf{x}'=\mathbf{x}}$$

$$-\frac{2e^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{x})\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}\tau^+)=0.$$

按这方式，总的超导电流成为

$$\mathbf{j}(\mathbf{x})=-\frac{e}{mi\beta}\sum_n[(\nabla-\nabla')\delta\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n)]_{\mathbf{x}'=\mathbf{x}}$$

$$-\frac{2e^2}{mc\beta\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{x})\sum_n\delta\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x},\omega_n).$$

剩下的计算取决于 $\delta\mathscr{G}$ 的显式，方程(53.29)的代入给出

$$\mathbf{j}(\mathbf{x})+\frac{2e^2}{mc\beta\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{x})\sum_n\delta\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x},\omega_n)$$

$$=\frac{e}{mi\beta\hbar^2}\sum_n\int d^3yd^3z\Delta(\mathbf{y})\Delta^*(\mathbf{z})\times\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{z},\mathbf{y},-\omega_n)$$

$$\times[\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{z},\mathbf{x},\omega_n)\nabla_{\mathbf{x}}\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x},\mathbf{y},\omega_n)$$

$$-\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x},\mathbf{y},\omega_n)\nabla_{\mathbf{x}}\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{z},\mathbf{x},\omega_n)]. \qquad (53.30)$$

空间导数可用方程(53.10)和(53.16)算出，其结果可因 $\mathbf{A}$ 的变化缓慢而加以简化，

$$\mathbf{j}(\mathbf{x})+\frac{2e^2}{mc\beta\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{x})\sum_n\delta\mathscr{G}(\mathbf{x},\mathbf{x},\omega_n)$$

$$=\frac{e^2}{mi\beta\hbar^2}\sum_n\int d^3yd^3z\Delta(\mathbf{y})\Delta^*(\mathbf{z})\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{z},\mathbf{y},-\omega_n)$$

$$\times\left\{-\frac{2ie\mathbf{A}(\mathbf{x})}{\hbar c}\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{x},\mathbf{y},\omega_n)\tilde{\mathscr{G}}^0(\mathbf{z},\mathbf{x},\omega_n)\right.$$

$$+e^{i\varphi(\mathbf{x},\mathbf{y})}e^{i\varphi(\mathbf{z},\mathbf{x})}[\mathscr{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{x},\omega_n)$$

$$\times\nabla_{\mathbf{x}}\mathscr{G}^0(\mathbf{x}-\mathbf{y},\omega_n)-\mathscr{G}^0(\mathbf{x}-\mathbf{y},\omega_n)$$

$$\times \nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{x},\omega_n)]\Big\}.$$

现在，右边第一项与左边第二项对消．用方程(53.17)中同样的近似，在 T_c 附近，超导电流成为

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{e}{mi\beta\hbar^2}\sum_n \int d^3y d^3z \mathcal{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{y},-\omega_n)\\ \times [\mathcal{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{x},\omega_n)\nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{G}^0(\mathbf{x}-\mathbf{y},\omega_n)\\ -\mathcal{G}^0(\mathbf{x}-\mathbf{y},\omega_n)\nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{x},\omega_n)]\\ \times\Big[|\Delta(\mathbf{x})|^2 - |\Delta(\mathbf{x})|^2\frac{2ie}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot(\mathbf{z}-\mathbf{y})\\ +\Delta^*(\mathbf{x})(\mathbf{y}-\mathbf{x})\cdot\nabla\Delta(\mathbf{x})\\ +\Delta(\mathbf{x})(\mathbf{z}-\mathbf{x})\cdot\nabla\Delta^*(\mathbf{x})\Big].\end{aligned} \tag{53.31}$$

由于球对称性，有些项恒等于零：

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{e}{mi\beta\hbar^2}\sum_n \int d^3y d^3z \mathcal{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{y},-\omega_n)\\ \times [\mathcal{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{x},\omega_n)\nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{G}^0(\mathbf{x}-\mathbf{y},\omega_n)\\ -\mathcal{G}^0(\mathbf{x}-\mathbf{y},\omega_n)\nabla_{\mathbf{x}}\mathcal{G}^0(\mathbf{z}-\mathbf{x},\omega_n)]\\ \times\Big[-\frac{2ie}{\hbar c}|\Delta(\mathbf{x})|^2\mathbf{A}(\mathbf{x})\cdot(\mathbf{z}-\mathbf{y})\\ +\Delta(\mathbf{x})\nabla_{\mathbf{x}}\Delta^*(\mathbf{x})\cdot\mathbf{z}\\ +\Delta^*(\mathbf{x})\nabla_{\mathbf{x}}\Delta(\mathbf{x})\cdot\mathbf{y}\Big].\end{aligned} \tag{53.32}$$

用方程(53.8)的 $\mathcal{G}^0$ 的 Fourier 表示，很容易进行剩下的积分，虽然冗长但直截了当的计算给出

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{7\zeta(3)n}{16(\pi k_B T_c)^2}\Big\{-\frac{2e\hbar}{2mi}[\Delta(\mathbf{x})^*\nabla\Delta(\mathbf{x})\\ -\Delta(\mathbf{x})\nabla\Delta^*(\mathbf{x})] - \frac{4e^2\mathbf{A}(\mathbf{x})}{mc}|\Delta(\mathbf{x})|^2\Big\}.\end{aligned} \tag{53.33}$$

用方程(53.23)中的波函数，终于得到

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{e\hbar}{2mi}[\Psi^*(\mathbf{x})\nabla\Psi(\mathbf{x}) - \Psi(\mathbf{x})\nabla\Psi^*(\mathbf{x})] - \frac{2e^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{x})|\Psi(\mathbf{x})|^2, \tag{53.34}$$

与方程(50.9)完全一致.

总起来说，我们已在下列一组假定下从 Gorkov 方程导出了 Ginzburg-Landau 方程(50.7 a)和(50.9):

1.有序参数 $\Delta(\mathbf{x})$ 和矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ 都是小量.

2.方程(53.5)和(53.30)的核的作用范围，比 $\Delta(\mathbf{x})$ 和 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ 的空间变化的特征长度(即相干长度 ξ 和穿透深度 λ)小得多.

3.程函近似也要求 $\lambda k_F \gg 1$(这一般是成立的).

对于任何超导电体，足够靠近转变温度 T_c 时，这些判据总是满足的.

习　　题

13.1　证明方程(49.6)可改写 $\partial\mathbf{Q}/\partial t + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{Q} = (\mathbf{Q}\cdot\nabla)\mathbf{v}$. 并由此证明穿过闭合曲面的磁通 $\Phi_Q \equiv \int d\mathbf{S}\cdot\mathbf{Q}$ 守恒，曲面是以随着流体运动的曲线为边界的. 作为推论，引出如下结论：准磁通 Φ 是严格的运动常数.

13.2　如 $F_s(T,0)$ 是零磁场中超导电体的自由能密度，试证，方程(49.11)是总的 Helmholtz 自由能

$$VF_s(T,0) + \int d^3x \left[(8\pi)^{-1}\mathbf{h}^2 + \frac{1}{2}n_s m\mathbf{v}^2\right]$$

在条件 $\operatorname{curl}\mathbf{h} = 4\pi\mathbf{j}/c$ 下任意把 h 变分的 Euler-Lagrange 方程. 对于正常金属，这个推导为什么不适用?

13.3　(a) 试对平行外场 $H_0\hat{\mathbf{x}}$ 中的块板计算平均 Helm-

holtz 自由能密度 [见习题 13.2 和方程 (49.16)]. 用方程 (48.13) 和 (49.17) 验证，在整个样品中，$\mathbf{H} = H_0\hat{\mathbf{x}}$，并求磁化强度 $(\bar{B} - H)/4\pi$.

(b) 从相应的 Gibbs 自由能证明，样品保持为超导电的，直到一个临界磁场 H_c^* 为止，H_c^* 决定于方程 $(H_c^*/H_c)^2 = [1 - (\lambda_L/d)\tanh(d/\lambda_L)]^{-1}$，其中 H_c 是大块样品的临界磁场. 讨论 $d \ll \lambda_L$ 和 $d \gg \lambda_L$ 的极限情况.

13.4 考虑半无限超导电体 $(z > 0)$，外磁场 H 平行于表面. 试用 Ginzburg-Landau 理论，就 $k \gg 1$ 求 $\Psi(z)$ 和 $h(z)$. 证明，与磁场有关的穿透深度 $\lambda(H)$ 由

$$[\lambda(H)/\lambda(0)]^2 = 2H_c/[H_c + (H_c^2 - H^2)^{\frac{1}{2}}]$$

给出. 试就各种各样的 H 值描画 h 和 Ψ 的空间变化. 对于 $H > H_c$，将发生什么情况？为什么允许违反边界条件 $d\Psi/dz = 0$?

13.5 (a) 作为极端的 II 类超导电体 $(\lambda \gg \xi)$ 的模型，试在半径为 ξ 的圆柱形孔的外部(见图 50.1b) 求解 London 方程 (49.11)，孔包含一个准磁通量子 $\varphi_0 = hc/2e$. 讨论 $\mathbf{h}$ 和 $\mathbf{j}$ 的空间形式.

(b) 像在习题 13.3 中那样，计算 Gibbs 自由能，并证明磁通穿透的下临界磁场由 $H_{c1} = (\varphi_0/4\pi\lambda)^2 \ln(\lambda/\xi)$ 给出.

13.6 考虑均匀外加场中的无限金属，场 H 足够强使得样品处于正常态. 求解线性化的 Ginzburg-Landau 方程，并求证，低于上临界场 $H_{c2}(T) = \sqrt{2}\,kH_c(T)$ 时，超导电解是可能的.

13.7 用方程 (51.3) 后面所勾画的步骤，在有限温度下，就势 $-g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ 推导 Hartree-Fock 理论.

13.8 在方程 (51.5) 中，保留 Hartree-Fock 项，试推导 $\mathscr{G}$ 和 $\mathscr{G}^\dagger$ 的一组推广的方程. 对于均匀系统求解这组方程，并与导致方程(37.33)到(37.35)的计算比较. 把这些方程具体

化于正常系统并重新导出第27节的结果.

13.9 (a) 在弱耦合极限 ($\Delta_0 \ll \hbar\omega_D$) 下,证明 BCS 能隙方程 (51.37) 可写成

$$\ln\frac{\Delta_0}{\Delta} = 2\int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{(\xi^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{e^{\beta(\xi^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}+1},$$

这里 Δ 是在温度 T 的能隙而 $\Delta_0 = \Delta(T=0)$,由此试推导方程(51.46 a).

(b) 在 T 靠近 T_c 时,试用方程 (51.35) 证明

$$\ln\frac{T}{T_c} = -\frac{7\zeta(3)}{8}\left(\frac{\Delta}{\pi k_B T}\right)^2 + O\left(\frac{\Delta}{k_B T}\right)^4,$$

并由此证明方程 (51.46 b).

13.10 (a) 在弱耦合极限 ($\Delta_k \ll \hbar\omega_D$) 下,试用假定

$$\Delta_k = \begin{cases} \Delta_1 & (|\xi_k| < \hbar\omega_D), \\ \Delta_2 & (\hbar\omega_D < |\xi_k| < \hbar\Omega_{pl}), \\ 0 & (\hbar\Omega_{pl} < |\xi_k|), \end{cases}$$

求解方程 (37.35),给定了粒子间的势[回忆 (37.6) 关于吸引势 $g > 0$ 的约定]

$$\langle \mathbf{k}-\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'-\mathbf{k}'\rangle = g_1 V^{-1}\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|)\theta(\hbar\omega_D - |\xi_{k'}|) - g_2 V^{-1}\theta(\hbar\Omega_{pl} - |\xi_k|)\theta(\hbar\Omega_{pl} - |\xi_{k'}|).$$

由此推导 $1 = N(0)g_{\text{eff}}\ln(2\hbar\omega_D/\Delta_1)$,这里

$$g_{\text{eff}} = g_1 - g_2[1 + N(0)g_2\ln(\Omega_{pl}/\omega_D)]^{-1}$$

(而不是人们也许"天真地"期望的 $g_1 - g_2$).

(b) 如 $k_B T_c = 1.13\,\hbar\omega_D e^{-1/N(0)g_{\text{eff}}}$ 而 $\omega_D \propto M^{-\frac{1}{2}}$,证明 $-d\ln(T_c/d)\ln M < \frac{1}{2}$,这可以解释过渡金属同位素效应为什么降低[1].

1) N. N. Bogoliubov, V. V. Tolmachev and D. V. Shirkov, "A New Method in the Theory of Superconductivity," chap. 6, Consultants Bureau, New York, 1959 (波戈留波夫等: 超导理论的新方法,第八章,杨槩译,科学出版社,1959).

13.11 试用方程(51.50)和(51.51)证明，超导电态的熵可写成

$$S_s = -2Vk_B\sum_{\mathbf{k}}\{f(E_k)\ln f(E_k) + [1-f(E_k)]\ln[1-f(E_k)]\},$$

这里 $f(E)=(e^{\beta E}+1)^{-1}$. 与习题 2.1 比较并解释结果.

13.12 作为超导电薄膜的模型，考虑载有均匀电流的无限大超导电体，能隙函数取 $\Delta e^{2i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}$ 形式，Δ 是实的 [见方程(53.23)和(53.34)] 而 $q \ll k_F$.

(a) 从 Gorkov 方程求解 $\mathscr{G}$ 和 $\mathscr{F}^\dagger$，并证明超导电流由 $\mathbf{j}\approx -e\mathbf{v}n_s(T)$ 给出，这里 $\mathbf{v}=\hbar\mathbf{q}/m$ [见方程(52.33)].

(b) 求出 Δ 的自洽条件. 在 $T=0$ 证明，如 $q<q_c\approx\Delta_0/\hbar v_F$，则 Δ 与 q 无关. 在 T_c 附近展开能隙方程以求出

$$\left[\frac{\Delta(T)}{k_BT_c}\right]^2 \approx \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)-\frac{2}{3}\left(\frac{\hbar^2k_F}{mk_BT_c}\right)^2q^2$$

并决定使 Δ 为零的 q 的临界值[1].

13.13 进行解析延拓以得到相应于习题 13.12 中的物理情况的实时热力学 Green 函数. 讨论 q 很小时的激发谱.

13.14 (a) 运用跟 Bose 系统(第 20 节)的类比，把电子-声子系统的 Dyson 方程推广到超导电体.

(b) 把电子自能用最低级贡献来近似，这些贡献用 $\mathscr{G}$，$\mathscr{F}$，$\mathscr{F}^\dagger$ 和 $\mathscr{D}$ 表出，并在动量空间中写出 $\mathscr{G}$ 和 $\mathscr{F}^\dagger$ 的耦合的自洽方程[2].

13.15 假定两个函数 $u(\mathbf{x})$ 和 $v(\mathbf{x})$ 满足耦合的本征值

---

1) 事实上，在临界值 $q_c\approx 1.23(\Delta_0/\hbar v_F)^2[1-(T/T_c)]^{1/2}$，系统作一级相变而进入正常态，这 q_c 小了一个因子 $1/\sqrt{3}$. 见例如，P. G. de Gennes, "Superconductivity of Metals and Alloys," pp. 182—184, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1966.

2) G. M. Eliashberg, *Sov. Phys. -JETP*, **11**: 696 (1960); **12**: 1000 (1960).

方程

$$\{(2m)^{-1}[-i\hbar\nabla + c^{-1}e\mathbf{A}(\mathbf{x})]^2 - \mu\}u(\mathbf{x}) - \Delta(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) = Eu(\mathbf{x}),$$

$$\{-(2m)^{-1}[i\hbar\nabla + c^{-1}e\mathbf{A}(\mathbf{x})]^2 + \mu\}v(\mathbf{x}) - \Delta^*(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) = Ev(\mathbf{x}),$$

这些叫作 Bogoliubov 方程[1]. 如 $u_j^{(+)}(\mathbf{x})$ 和 $v_j^{(+)}(\mathbf{x})$ 是具有正能量 E_j 的解，证明总存在具有负能量 $-E_j$ 的第二个解

$$u_j^{(-)}(\mathbf{x}) = -v_j^{(+)}(\mathbf{x})^*, \quad v_j^{(-)}(\mathbf{x}) = u_j^{(+)}(\mathbf{x})^*.$$

设 $\mathbf{U}$ 是二分量矢量，其元素为 u 和 v. 用通常的定义

$$(\mathbf{U},\mathbf{U}) = \int d^3x(|u|^2 + |v|^2),$$

证明 $(\mathbf{U}_j^{(\pm)},\mathbf{U}_{j'}^{(\pm)}) = \delta_{jj'}$，而 $(\mathbf{U}_j^{(\pm)},\mathbf{U}_{j'}^{(\mp)}) = 0$. 作出 $\mathcal{G}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n)$ [方程 (51.19)] 的本征函数展开，并由此用这些本征函数把 $n(\mathbf{x})$ 和 $\Delta(\mathbf{x})$ 表出. 为什么 E_j 是单粒子激发能？针对均匀介质具体化，并重新导出第 51 节的结果.

13.16 求证方程 (52.34 a) 和 (52.34 b).

13.17 (a) 如果方程 (49.39) 中的 $K(q)$ 在 $q \to 0$ 时按 $K(q) \approx \alpha q^2$ 变为零，用方程 (49.34 b) 证明，逆磁导磁率由 $\chi_d = -\alpha/4\pi(1+\alpha) \approx -\alpha/4\pi$ 给出，假设 $\alpha \ll 1$.

(b) 在正常金属中，计算 $\mathcal{P}_{kl}(\mathbf{q},\nu_n)$ [方程 (52.25)] 以导出 $K_n(q)$ 的一般的式子. 由此证明，无相互作用电子气的 Landau 逆磁导磁率 χ_d 在一切温度下由 $\chi_d = -\frac{1}{3}\chi_p$ 给出，这里 χ_p 是相应的顺磁导磁率 (习题 7.5). (注意，对于电子，$\mu_0 = e\hbar/2mc$.)

13.18 (a) 用线性响应理论证明超导电体的自旋导磁率

---

1) 这些方程的详细讨论见 P. G. de Gennes, "Superconductivity of Metals and Alloys," chap. 5, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1966.

χ 由下式给出

$$\frac{\chi}{\chi_p} = \frac{2}{3\pi^2}\frac{\varepsilon_F^0}{n}\int_0^\infty p^2 dp \left[-\frac{\partial f(E_p)}{\partial E_p}\right],$$

这里 χ_p 是正常金属 Pauli 导磁率(习题 7.5).

(b) 验证下列极限: 在 $T=0$, $\chi=0$; 而在 $T=T_c$, $\chi=\chi_p$. 解释这些结果.

13.19 在有限温度下对超导电体重作习题 12.6. 证明近似的声子传播函数可写为

$$\mathscr{D}(q,\nu_n) = -\hbar\omega_q^2[\nu_n^2+\omega_q^2+\omega_q^2\gamma^2\mathscr{R}(q,\nu_n)]^{-1} \times \theta(\omega_D-\omega_q).$$

这里

$$\mathscr{R}(q,\nu_n) = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\Big\{(u_+u_- - v_+v_-)^2[f(E_+)-f(E_-)] \times\left[\frac{1}{i\hbar\nu_n-(E_- - E_+)} - \frac{1}{i\hbar\nu_n+(E_- - E_+)}\right] + (u_+v_- + u_-v_+)^2[1-f(E_+)-f(E_-)] \times\left[\frac{1}{i\hbar\nu_n-(E_+ + E_-)} - \frac{1}{i\hbar\nu_n+(E_+ + E_-)}\right]\Big\},$$

而记号是方程 (52.27) 中的记号[1].

(b) 试导出推迟声子 Green 函数 $D^R(q,\omega)$. 如 $\hbar\omega \ll 2\Delta$, 试求超导电体中的超声衰减系数 α_s, 并求证 $\alpha_s/\alpha_n = 2f(\Delta)$, 这使得可以直接测量 $\Delta(T)$ (见图 51.1).

13.20 推导方程 (53.33).

---

1) 关于超声和电磁吸收的详细比较, 见 J. R. Schrieffer, "Theory of Superconductivity," chap. 3, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1964.

第十四章　超　流　氦

元素氦有两个稳定的同位素，He^3（费米子）和 He^4（玻色子），它们的不同只在于原子核中相差一个中子[1]．在低压下，直到温度为绝对零度，两种同位素都保持为液体，在绝对零度也只有在大约 30 大气压（He^3）或 25 大气压（He^4）的外加压力下才固化（图 54.1）．既然经典系统在充分低的温度下总是要结晶的，这些物质就称为量子液体．它们的独特性能是两种现象结合起来的结果，一是原子间吸引很弱（由于 ls 电子壳层是闭合的），二是原子质量很小，原子质量很小就使零点振动大．作为推论，两种液体的密度都很低；$\rho_3 \approx 0.081$ 克/厘米^3 而 $\rho_4 \approx 0.145$ 克/厘米^3．

这两种同位素尽管表面上相似，却有着深刻的差异，这是由于它们的量子统计不同．Pauli 原理倾向于使费米子分开，粒子间势只牵涉 $k > k_F$ 的未微扰态．这行为导致恢复长度小，并证明了采用独立对偶近似计算核物质和液 He^3 之类正常 Fermi 系统的基态能量和激发谱是合理的．对于玻色子，情况很不相同，因为粒子倾向于占据同一个单粒子态．此外，粒子间势优先地牵连已占据的未微扰态，从而加强了多体效应．例如，独立粒子模型的成功表明，正常 Fermi 系统的较

1) He 的低温性质的一般描述见于 K.R.Atkins, "Liquid Helium", Cambridge University Press, Cambridge, 1959; R.J. Donnelly, "Experimental Superfluidity", University of Chicago, 1967; F.London, "Superfluids," vol. II, Dover Publications, Inc., New York, 1964; J.Wilks, "The Properties of Liquid and Solid Helium," Oxford University Press, Oxford, 1967.

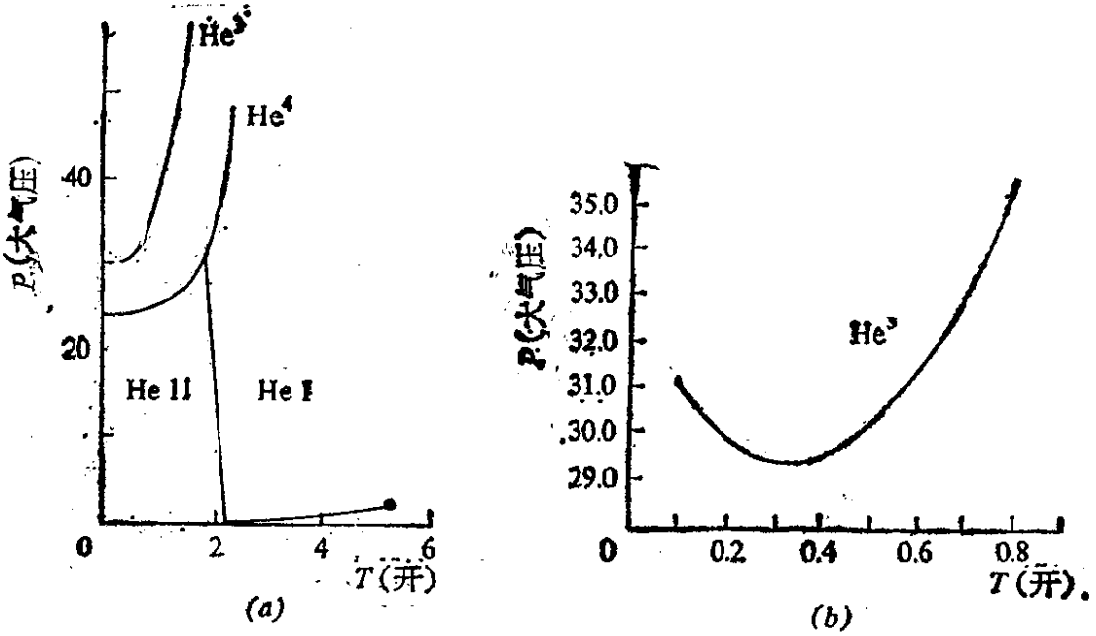


图 54.1 (a) PT 平面中 He^3 和 He^4 的相图之比较. (引自 J. DeBoer, Excitation Model for Liquid Helium II, Course XXI, Liquid Helium, Proceedings of "The International School of Physics, 'Enrico Fermi'," p.3, Academic Press, New York, 1963.) (b) He^3 熔化曲线的放大部分. (引自 D. P. Kelly and W. J. Haubach, "Comparative Properties of Helium-3 and Helium-4," AEC Research and Development Report MLM-1161, p.18.)

低的态一般类似于自由 Fermi 气体的态. 这种对应关系对于有限质量的相互作用的玻色子显然失效，玻色子系统的较低的激发，通常具有集体声子特点[1]. 玻色子和费米子之间的区别也出现于稀薄刚性核气体的展开式中. 虽然这种系统可作为核物质与 He^3 的有用的模型，但方程 (22.19) 的改正项对 He^4 算出为 $(128/15)(na^3/\pi)^{\frac{1}{2}} \approx 2.4$，这里 $(na^3)^{\frac{1}{2}} \approx 0.5$[2]. 作为最后一个区别，注意甚至自由的 Bose 气体也展示一种错综的相变 (比较图 5.2 和 5.4).

1) R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **91**:130, (1953); **94**:262 (1954).

2) 我们按照 N.M.Hugenholtz and D.Pines, *Phys. Rev.*, **116**:489(1959), p.505, 取 $a = 2.2$Å. 又见 F.London, 前引书, p.22.

54. He II 的基本性质

首先综述超流 He^4 的一些重要特点.

基本的实验事实

(1) λ 点：液 He^4 与它的蒸汽接触，冷却到 $T_\lambda = 2.71K$ 以下，它进入一个新的相，叫作 He II. 这相变的标记是比热出现一个峰，在相变的两侧，比热的行为有如 $\ln|T - T_\lambda|$[1]. 一般认为这个奇点代表 Bose 凝聚的开始，但现有的理论均不能提供这种相变的令人满意的描述.

(2) *超流动性和二流体模型*：He II 具有值得注意的流体动力学性质.它可以无压力降地流过细管，似乎可以推出粘度为零. 另一方面，直接测量粘度（例如用旋转圆柱粘度计）得出的数值，与 T_λ 以上的 He I 的粘度相差不大.这个表面上的矛盾由 Tisza[2] 和 Landau[3] 用二流体模型作出解释，在这模型中，He II 被认为是两种互相渗透的组元的混合物：一种是密度为 ρ_s 而速度为 $\mathbf{v}_s$ 的超流体，另一种是密度为 ρ_n 而速度为 $\mathbf{v}$ 的正常流体. 超流体假定为无粘滞的，这说明通过细管的迅速流动，又假定为无旋的，

$$\operatorname{curl} \mathbf{v}_s = 0. \tag{54.1}$$

正常流体的行为像经典的粘滞流体，它提供所测出的 He II 的粘度. Andronikashvili[4] 用间隔很小的圆盘组成的扭摆悬挂在

---

1) M. J .Buckingham and W. M. Fairbank, The Nature of the λ-Transition in Liquid Helium, in C.J. Gorter (ed.), "Progress in Low Temperature Physics, "vol. III, p.80, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1961.

2) L. Tisza, *Nature*, **141**:913 (1938).

3) L. D. Landau, *J. Phys. (USSR)*, **5**:71 (1941); **11**:91(1947).

4) E. L. Andronikashvili, *J. Phys. (USSR)*, **10**:201 (1946).

He II 中而令人注目地证实了二流体模型.振动的圆盘拖曳着正常流体，从而可以直接测量 $\rho_n(T)$，它在 $T \ll T_\lambda$ 按 T^4 变化(图 54.2).

(3) 第二声：由于存在两种组元，He II 就有一个额外的自由度，Landau 预测 He II 可支持两种独立的振动模，这两种模的 $\mathbf{v}_s$ 和 $\mathbf{v}_n$ 的相对周相是不同的. 如果 $\mathbf{v}_n$ 和 $\mathbf{v}_s$ 一致变化，波所传送的是密度和压强的变化(在不变的温度和熵下)，就叫作第一声或普通声. 但如 $\mathbf{v}_n$ 和 $\mathbf{v}_s$ 相反，这种模传送 ρ_s/ρ_n 的周期变化，因而是温度和熵的波 (在不变的密度和压强下)，叫作第二声. 其计算过程是推导方程(16.19)的过程的直截了当的推广，我们只指出，第二声的速度正比于 $(\rho_s/\rho_n)^{\frac{1}{2}}$，它表示两个组元的重要程度[1]. 第二声首先由 Peshkov 观测到[2]; ρ_s 和 ρ_n 的相应数值与从振动圆盘得到的数值符合得很好(图 54.2).

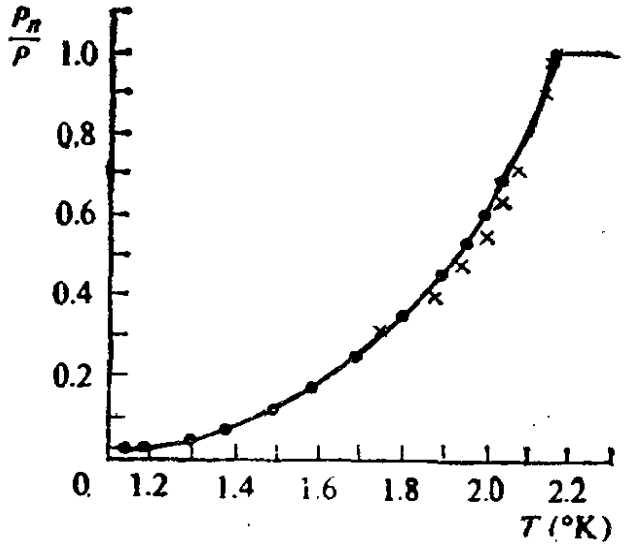


图 54.2 ρ_n/ρ 随温度的变化. 圆点是从第二声的速度得出；叉号是从振动圆盘方法得出. [引自 V. P. Peshkov, *J.Phys.* (*USSR*), **10**:389 (1946), 图 6.]

1) L. D. Landau, 前引文.

2) V. P. Peshkov, *J.Phys.* (*USSR*), **10**:389 (1946).]

(4) 临界速度：超流体的流动不可能持续到任意高的速度；而是有一个临界速度 v_c，在此速度时，它成为有损耗的，v_c 取决于管道的宽度 d；而如果温度不是很靠近 T_λ，v_c 与温度无关，虽然 $v_c(d)$ 的精确函数形式是不肯定的，许多实验可近似地用关系式 $v_c \approx \hbar/md$ 来描写，这里 m 是氦原子的质量[1]。

(5) 转动 HeII 和涡旋[2]：如 v_s 远小于声速，可把超流体当作不可压缩的来处理 ($\mathrm{div}\,\mathbf{v}_s = 0$)。其结果是 $\mathbf{v}_s$ 可从满足 Laplace 方程的速度势导出

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m}\nabla\varphi, \tag{54.2}$$

$$\nabla^2\varphi = 0. \tag{54.3}$$

考虑单连通的柱，绕其轴以角速度 ω 转动。边界条件 $\partial\varphi/\partial n = 0$ 保证 φ 是常数，所以对任意 ω 都有 $\mathbf{v}_s$ 为零。这样，从方程 (54.1) 可知，超流体不可能参与转动，自由液面的形状应由下列方程给出

$$z = \frac{\omega^2 r^2}{2g}\frac{\rho_n}{\rho}, \tag{54.4}$$

这里 g 是重力加速度。这个效应应当是容易观测的，因为温度在 1.5 K 以下时，ρ_n/ρ 变得很小。方程 (54.4) 由 Osborne 首先加以检验[3]，他发现并不如此，自由面却是经典流体的自由面

---

1) 但是，参阅 W. M. VanAlphen, G.J. Van Haasteren, R. De Bruyn Ouboter and K. W. Taconis, *Phys. Letters*, **20**: 474 (1966)，他们发现 $v_c = Cd^{-\frac{1}{4}}$，C 是常数，在 cgs 单位制中，C 的数量级为 1。

2) 关于这个题目的综述有 E. L. Andronikashvili 和 Yu. G. Mamaladze, *Rev. Mod. Phys.*, **38**:567 (1966) 和 A. L. Fetter, Theory of Vortices and Rotating Helium, in K. T. Mahanthappa and W. E. Brittin (eds.), "Lectures in Physics," vol. XI-B, p.321, Gordon and Breach, Science Publishers, New York, 1969.

3) D. V. Osborne, *Proc. Phys. Soc.*, **A63**:909 (1950).

$$z_{cl} = \frac{\omega^2 r^2}{2g}, \tag{54.5}$$

与温度无关. 为解释这分歧，我们重新审查方程 (54.1) 的柱对称解，它必须取如下形式

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{\text{常数}}{r}\hat{\theta}, \tag{54.6}$$

这里 $\mathbf{r} = (r, \theta)$ 是 xy 平面中的矢量. 如果处处(包括原点)有 $\operatorname{curl} \mathbf{v}_s = 0$，常数必定是零. 既然这个预测与 (54.5) 矛盾，Feynman[1] 建议一个不那么严格的条件，允许 $\operatorname{curl} \mathbf{v}_s$ 在流体中某些孤立点成为奇异的. 奇点的强度可由环流

$$\kappa = \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v} \tag{54.7}$$

表征，相应的对称解成为

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{\kappa}{2\pi r}\hat{\theta}, \tag{54.8}$$

这精确地是平行于 z 轴的直线涡旋的经典速度. Feynman 进一步假定，转动的 HeII 包含平行涡旋的均匀阵列，涡旋分布密度是每单位面积 $2\omega/\kappa$. 在宏观尺度上，所得的超流体速度场与均匀转动 $\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ 是不可区分的，因为两种流动式样给出的环绕任一迴路的环流相同，只要这些迴路比涡旋之间的间隔大得多 (习题 14.2). 此外，超流体现在也对压低弯液面作出贡献，从而使 Osborne 实验与推广的条件(即 $\operatorname{curl} \mathbf{v}_s$ 几乎处处等于零) 两者不矛盾了.

(6) 量子化的环流；把方程 (54.7) 乘以 m；所得的方程

$$m\kappa = \oint d\mathbf{l} \cdot m\mathbf{v} = \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{p} \tag{54.9}$$

---

1) R. P. Feynman, Application of Quantum Mechanics to Liquid Helium, in C. J. Gorter (ed), "Progress in Low-Temperature Physics," vol. I. p.17, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1955

又使人们想起 Bohr-Sommerfeld 条件[比较方程 (49.26) 和 (49.27)], Onsager[1] 和 Feynman[2] 各自独立地提议 HeII 中的环流是量子化的,其单位量子为

$$\kappa = \frac{h}{m} = 0.997 \times 10^{-3} \text{ 厘米}^2/\text{秒}. \qquad (54.10)$$

这个预测已经在复连通区的无旋流动[3]和涡旋环[4]中证实. 现在有可能求出单位长度涡旋线的能量

$$\begin{aligned} E_v &= \int d^2r \, \frac{1}{2} \rho_s v_s^2 \\ &= \frac{\rho_s \kappa^2}{4\pi} \int \frac{dr}{r} \\ &\approx \frac{\rho_s \kappa^2}{4\pi} \ln \frac{R}{\xi}. \end{aligned} \qquad (54.11)$$

这里 R 是上截止，它可解释为圆柱容器的半径，而 ξ 是下截止,它是涡旋核的半径. 实验[5] 指出 $\xi \approx 1$ Å，所以对于 $R \approx$ 1 厘米，$E_v \approx 1.3 \times 10^5$ 电子伏/厘米.

Landau准粒子模型

在低温下 ($T \ll T_\lambda$)，HeII 的比热按 T^3 变化. 为解释这个观测结果，Landau[6] 把 HeII 的低激发态解释为弱相互作用的声子气体,具有通常的色散关系

$$\varepsilon_k = \hbar c k \qquad \text{(声子)}, \qquad (54.12)$$

这里 $c = 238$ 米/秒是 (第一) 声的速率. 更一般地，他建议,能谱具有图 54.3 所示的形状,在 $k = 0$ 附近是直线(声子)

1) L. Onsager, *Nuovo Cimento*, **6**, Suppl. 2, 249(1949).
2) R.P.Feynman, "Progress in Low-Temperature Physics," 前引文.
3) W. F. Vinen, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A 260**:218 (1961).
4) G.W.Rayfield and F.Reif, *Phys. Rev.*, **136**:A1194(1964).
5) G.W.Rayfield and F. Ref. 前引文.
6) L. D. Landau, 前引文.

区，而在 k_0 附近有一下陷，在那里 ϵ_k 的行为有如

$$\epsilon_k = \Delta + \frac{\hbar^2(k-k_0)^2}{2\mu_r} \quad (\text{旋子}). \tag{54.13}$$

具有后一色散关系的激发叫作旋子. Landau 原来决定旋子的参数时是使其与大约 0.6K 以上的比热拟合的. 但近年来，已经用非弹性中子散射十分详细地证实了图 54.3 中的理论曲线[1](比较习题 5.13)，这给出同样那些参数的较为准确的独立

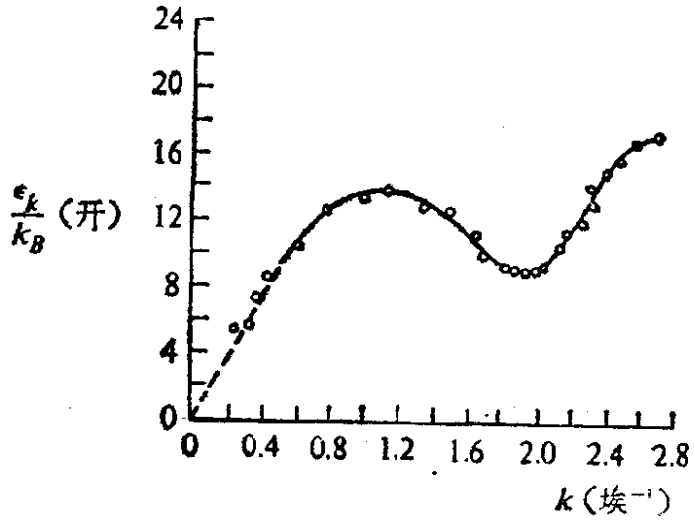


图 54.3 液氦的色散曲线. 实验点子来自中子散射测量.
[引自 D. G. Henshaw and A. D. B. Woods, *Phys. Rev.*, **121**:1266(1961), 图 4.]

表 54.1 旋子参数

	Landau(1947)[1]	中子散射 (1959)[2]
Δ/k_B	9.6 K	8.6 K
k_0	1.95 埃$^{-1}$	1.91 埃$^{-1}$
μ_r	0.77 m_{He}	0.16 m_{He}

1) 来源: L. D. Landau, *J. Phys.* (*USSR*), **11**:91 (1947).
2) 来源: D. G. Henshaw and A. D. B. Woods, *Phys. Rev.*, **121**:1266 (1961).

1) D. G. Henshaw and A. D. B. Woods, *Phys. Rev.*, **121**:1266(1961).

测量(表 54.1).

在 Landau 的 He II 模型中,总自由能来自热激发的准粒子,它们是作为理想 Bose 气体处理的[1]. 既然准粒子数 N_{qp} 不守恒,它必须用自由能取极小来决定,

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N_{qp}}\right)_{TV} = 0, \tag{54.14}$$

与方程 (4.6) 的比较表明相应的化学势为零 [见方程 (44.19) 和 (44.20) 的讨论]. 于是,热力学势 Ω 归结为 Helmholtz 自由能 F,而方程(5.8) 和 (5.9) 给出

$$F(T, V) = k_B T V (2\pi)^{-3} \int d^3k \ln(1 - e^{-\beta\epsilon_k}), \tag{54.15}$$

$$N_{qp}(T, V) = V(2\pi)^{-3} \int d^3k (e^{\beta\epsilon_k} - 1)^{-1}, \tag{54.16}$$

这里 ϵ_k 是引自图 54.3 的准确色散关系,而 $\beta = (k_B T)^{-1}$. 但在低温下,只有声子和旋子的部分作出重要的贡献,可把对 k 的积分分为独立的两部分

$$F = F_{ph} + F_r, \tag{54.17}$$

$$N_{qp} = N_{ph} + N_r. \tag{54.18}$$

于 $T \to 0$, 可以假定方程 (54.12) 和 (54.13) 各自对一切 k 成立. 直截了当的计算给出

$$N_{ph} = \frac{\zeta(3)}{\pi^2} V \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3, \tag{54.19 a}$$

$$F_{ph} = -\frac{\pi^2}{90} V k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3, \tag{54.19 b}$$

$$N_r = \frac{2V k_0^2}{\hbar (2\pi)^{\frac{3}{2}}} (\mu_r k_B T)^{\frac{1}{2}} e^{-\Delta/k_B T}, \tag{54.20 a}$$

---

1) 一个等价的方法是用近似的准粒子哈密顿函数 $\hat{H}_{qp} = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k$ 来描述 He II, 这里 ϵ_k 是图 54.3 的激发谱.

$$F_r = -k_B T N_r. \tag{54.20b}$$

于是，相应的熵和热容量从通常的关系式

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V, \quad C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \tag{54.21}$$

得出. 很清楚，C_{Vph} 按 T^3 变化，而 C_{Vr} 指数式变为零；两个预测都被实验证实.

除了上述热力学函数以外，Landau 的准粒子描述还证明了二流体模型是合理的，并可以从而计算正常流体密度. 考虑这样一种情况，准粒子相对于超流体的静止系具有平均漂移速度 $\mathbf{v}$. 它们的平均分布，从该静止系看来[1]是 $f(\epsilon_k - \hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v})$，这里 $f(\epsilon) = (e^{\beta\epsilon} - 1)^{-1}$ 是通常的 Bose 分布函数. 在同一静止系中，准粒子所载的总动量由下式给出，

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= V(2\pi)^{-3}\int d^3k\hbar\mathbf{k}f(\epsilon_k - \hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}) \\ &\approx V(2\pi)^{-3}\int d^3k\hbar\mathbf{k}\left[f(\epsilon_k) - \hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial\epsilon_k} + \cdots\right] \\ &\approx \frac{V\hbar^2}{6\pi^2}\mathbf{v}\int_0^\infty dk k^4\left[-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial\epsilon_k}\right].\end{aligned} \tag{54.22}$$

这样，准粒子的流动伴随着净的动量流量；比例系数是正常流体质量密度的定义，

$$\rho_n(T) \equiv \frac{\hbar^2}{6\pi^2}\int_0^\infty dk k^4\left[-\frac{\partial f(\epsilon_k)}{\partial\epsilon_k}\right], \tag{54.23}$$

而超流体质量密度成为

$$\rho_s(T) = \rho - \rho_n(T). \tag{54.24}$$

这结果与第 52 节所讨论的超导电体中超导电子密度很相似.

---

1) 这结果用微正则系综最容易导出，在这系综中，准粒子系统具有固定的能量 E 和动量 $\mathbf{P}$. 附加的约束（固定的 $\mathbf{P}$）需要附加的 Lagrange 乘子 $\mathbf{v}$. 而熵取极大值，立刻验证了上述论断. 见例如 F. London, 前引书, pp. 95—96, 以及习题 14.4.

事实上，方程 (52.33) 和 (54.23) 的比较表明，它们的差别只在于统计和自旋简并性.

当方程(54.23)分为声子和旋子贡献时，初等的计算给出

$$\rho_{nph}=\frac{2\pi^2 h}{45c}\left(\frac{k_BT}{\hbar c}\right)^4, \tag{54.25 a}$$

$$\rho_{nr}=\frac{\hbar^2 k_0^2 N_r}{3k_BTV}, \tag{54.25 b}$$

它们的和可以与观测结果拟合，相差不超过实验误差. 而作出 $\rho_n(T)$ 的这一预测时，还没有任何实验结果，这样就提供了特别令人注目的关于准粒子模型的验证.

Landau 的描述，还给出 HeII 中临界速度的定性解释. 考虑质量为 M 的宏观物体以速度 $\mathbf{v}$ 穿行于零温度下的静止 HeII 中. 在这情况下，动量和能量分别为，

$$\mathbf{P}=M\mathbf{v}, \quad E=\frac{1}{2}Mv^2. \tag{54.26}$$

如果物体激发起一个动量为 $\mathbf{p}$ 而能量为 ε 的准粒子，新的速度 $\mathbf{v}'$ 由动量守恒决定，

$$\mathbf{v}'=\mathbf{v}-\frac{\mathbf{p}}{M}. \tag{54.27}$$

相应地，新的能量 E' 成为

$$\begin{aligned}E'&=\frac{1}{2}Mv'^2\\&=\frac{1}{2}Mv^2-\mathbf{p}\cdot\mathbf{v}+\frac{p^2}{2M}\\&\approx E-\mathbf{p}\cdot\mathbf{v},\end{aligned} \tag{54.28}$$

这里略去了反冲能量 $p^2/2M$，因为 M 很大. 在充分低的速度，这过程违背能量守恒

$$E-E'=\varepsilon. \tag{54.29}$$

但随着 v 增大，终将达到一个临界速度 v_c，其时 $\varepsilon-\mathbf{p}\cdot\mathbf{v}_c$ 初

次为零. 显然，$\mathbf{p}$ 将平行于 $\mathbf{v}_c$，简单的整理给出 Landau 临界速度

$$v_c = \left(\frac{\varepsilon}{p}\right)_{\min}, \tag{54.30}$$

这里 ε 取自图 54.3. 假如 ε 是纯粹的声子谱，ε/p 的极小值将是声速 $c \approx 238$ 米/秒. 但包括旋子后，v_c 降至 $\approx \Delta/\hbar k \approx 60$ 米/秒，这种由旋子限制的临界速度，已用受压的 HeII 中的离子观测到[1].

类似的理论描述适用于管道中的流动，因为用一个伽利略变换而变换到超流体的静止系统，就重现前面的情况，管壁则作为宏观物体. 不幸的是，预测的临界速度≈60 米/秒，它是太大了，不能解释实验观察到的超流体流动在管道中消失的现象. 因而 v_c 被认为是有量子化涡旋在管道中产生的信号[2].

55. 弱相互作用的 Bose 气体

第六章和第 35 节的微观描述只限于 $T = 0$ 的稳定 Bose 系统，现在把理论推广，以包括有限温度下的空间不均匀系统. 虽然这样的问题可以很一般地处理[3]，这里的讨论却限于弱相互作用 Bose 气体，由于凝聚态的耗尽度小，可以详细地把计算进行下去. 如前面所注意到，这个模型十分不现实，因为 He II 基态的耗尽度一般认为是不小的 (≈90%)[4].

1) G. W. Rayfield, *Phys. Rev. Letters*, **16**:934(1966).
2) 见例如 R. P. Feynman, "Progress in Low-Temperature Physics," 前引文.
3) 见例如 P. C. Hohenberg and P. C. Martin, *Ann. Phys.* (*N. Y.*), **34**:291 (1965).
4) O. Penrose and L. Onsager, *Phys. Rev.*, **104**:576 (1956); W. L., McMillan, *Phys. Rev.*, **138**:442 (1965).

此外，这模型在靠近相变时具有错综复杂的行为[1]，所以我们将只研究低温性质. 但是，非理想 Bose 气体，包含 Landau 准粒子模型的许多特点，并清楚地阐明了凝聚 Bose 系统的内在特殊困难.

一般表述

考虑具有巨正则哈密顿函数

$$\hat{K} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})[T(\mathbf{x}) - \mu]\hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}')V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{\psi}(\mathbf{x}')\hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (55.1)$$

的玻色子系集，这里 $T(\mathbf{x}) = -\hbar^2\nabla^2/2m$ 是动能. 既然方程 (55.1) 完全是一般的，很清楚，严格解是不可能的，必须引入适合凝聚 Bose 系统的近似. 作为启发，我们回想 Bogoliubov 近似 $\hat{\psi}(\mathbf{x}) \to \xi_0 + \hat{\varphi}(\mathbf{x})$ （第 18 和 19 节），用来分析均匀的稳定 Bose 系统基态 $|\mathbf{O}\rangle$. 动量守恒进一步意味着 $\langle\mathbf{O}|\hat{\varphi}(\mathbf{x})|\mathbf{O}\rangle = 0$ [方程 (19.9)]，所以，量 ξ_0 可解释为场算符

$$\langle\mathbf{O}|\hat{\psi}(\mathbf{x})|\mathbf{O}\rangle = \xi_0 \quad \text{（均匀系统）} \quad (55.2)$$

的基态平均值. 现在把 Bose 凝聚的概念推广到有限温度和非均匀系统，假定只要系综平均值 $\langle\hat{\psi}(\mathbf{x})\rangle$ 在热力学极限中保持有限，玻色子系集就凝聚. 引入记号

$$\Psi(\mathbf{x}) \equiv \langle\hat{\psi}(\mathbf{x})\rangle \quad (55.3)$$

和*偏差算符*

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\psi}(\mathbf{x}) - \langle\hat{\psi}(\mathbf{x})\rangle = \hat{\psi}(\mathbf{x}) - \Psi(\mathbf{x}) \quad (55.4)$$

是方便的. c 数函数 $\Psi(\mathbf{x})$ 常常叫作*凝聚态波函数*；它十分类似于超导电体中能隙函数 $\Delta(\mathbf{x})$. 确实，这种有限的反常幅

1) K. Huang, C. N. Yang and J. M. Luttinger, *Phys. Rev.*, **105**: 776 (1957).

度的存在可作为凝聚量子液体的一般判据[1]. 注意方程(55.3)和(51.14)仅仅是一般的定义. 在实际计算中，它们必须按某种近似方案算出，近似方案取决于所考虑的具体系集.

在这里的弱相互作用系统中，差不多所有的粒子都在凝聚态中. 因此，算符 $\hat{\varphi}$ 可看作 Ψ 的小改正量，我们把 $\hat{K}$ 用 $\hat{\varphi}$ 和 $\hat{\varphi}^\dagger$ 的幂展开，只保留线性的和二次的项:

$$\hat{K} = K_0 + \hat{K}_l + \hat{K}', \tag{55.5}$$

这里

$$K_0 = \int d^3x \Psi^*(\mathbf{x})[T(\mathbf{x}) - \mu]\Psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\int d^3x d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')|\Psi(\mathbf{x})|^2|\Psi(\mathbf{x}')|^2, \tag{55.6}$$

$$\begin{aligned}\hat{K}_l = &\int d^3x \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})\Big[T(\mathbf{x}) - \mu \\ &+ \int d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')|\Psi(\mathbf{x}')|^2\Big]\Psi(\mathbf{x}) \\ &+ \int d^3x \Big\{\Big[T(\boldsymbol{x}) - \mu \\ &+ \int d^3x' V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')|\Psi(\boldsymbol{x}')|^2\Big]\Psi^*(\boldsymbol{x})\Big\}\hat{\varphi}(\mathbf{x}),\end{aligned} \tag{55.7}$$

$$\begin{aligned}\hat{K}' = &\int d^3x \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})[T(\mathbf{x}) - \mu]\hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \int d^3x\, d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\ &\times \Big[|\Psi(\mathbf{x}')|^2\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\varphi}(\mathbf{x})\end{aligned}$$

1) 这个概念首先见于 V. L. Ginzburg and L.D.Landau, *Zh. Exsp. Teor. Fiz.*, **20**:1064 (1950) 和 O. Penrose and L. Onsager, 前引文; 它是 London 的“长程有序” [F. London, 前引书, vol. I, secs. 24—26 和 vol.II, secs. 22] 的较精确表述. 又，见 C. N. Yang, *Rev. Mod. Phys.*, **34**:694(1962).

$$+\Psi^*(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}')\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x})$$
$$+\frac{1}{2}\Psi^*(\mathbf{x})\Psi^*(\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x}')\hat{\varphi}(\mathbf{x})$$
$$+\frac{1}{2}\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x})\Big]. \tag{55.8}$$

所得的哈密顿函数可用选取 Ψ 满足下列非线性场方程式的办法加以简化，

$$[T(\mathbf{x})-\mu]\Psi(\mathbf{x})+\int d^3x' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')|\Psi(\mathbf{x}')|^2\Psi(\mathbf{x})$$
$$=0, \tag{55.9}$$

这方程可解释为凝聚体波函数的自洽 Hartree 方程[1]. 按这方式，线性项 $\hat{K}_1$ 恒等于零，从而给出二次式的有效哈密顿函数

$$\hat{K}_{\text{eff}}=K_0+\hat{K}'. \tag{55.10}$$

引入统计算符

$$\hat{\rho}_{\text{eff}}=\frac{e^{-\beta\hat{K}_{\text{eff}}}}{\text{Tr}e^{-\beta\hat{K}_{\text{eff}}}} \tag{55.11}$$

和相应的系综平均

$$\langle\cdots\rangle=\text{Tr}(\hat{\rho}_{\text{eff}}\cdots) \tag{55.12}$$

可使理论自洽. 既然 $\hat{K}_{\text{eff}}$ 与 $\hat{N}$ 不可对易，凝聚态波函数

$$\Psi(\mathbf{x})=\text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{eff}}\hat{\psi}(\mathbf{x})] \tag{55.13}$$

可以是有限的，这跟正常系统的情况适成对比.

剩下的描述是完全按照与第 51 节对超导电体的处理直接进行类比而得出的. 引入 Heisenberg 算符

$$\begin{cases}\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}\tau)=e^{\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar}\hat{\varphi}(\mathbf{x})e^{-\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar},\\ \hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}\tau)=e^{\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar}\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x})e^{-\hat{K}_{\text{eff}}\tau/\hbar},\end{cases} \tag{55.14}$$

它们满足线性场方程

1) E. P. Gross, *Ann. Phys. (N. Y.)*, 4:57 (1958); 与 *J. Math. Phys.*, 4:195 (1963).

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}\tau)=-\Big[T(\mathbf{x})-\mu+\int d^3x'V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')|\Psi(\mathbf{x}')|^2\Big]\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}\tau)-\int d^3x'V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')[\Psi^*(\mathbf{x}')\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}'\tau)+\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau)\Psi(\mathbf{x}')]\Psi(\mathbf{x}),\qquad(55.15\,a)$$

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}\tau)=\Big[T(\mathbf{x})-\mu+\int d^3x'V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')|\Psi(\mathbf{x}')|^2\Big]\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}\tau)+\int d^3x'V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')[\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau)\Psi(\mathbf{x}')+\Psi^*(\mathbf{x}')\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}'\tau)]\Psi^*(\mathbf{x}).\qquad(55.15\,b)$$

这些场算符可用以定义单粒子 Green 函数[比较方程 (19.4)]

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=-\langle T_\tau[\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}\tau)\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau')]\rangle=-\Psi(\mathbf{x})\Psi^*(\mathbf{x}')+\mathcal{G}'(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau'),\qquad(55.16)$$

这里

$$\mathcal{G}'(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')\equiv-\langle T_\tau[\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}\tau)\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau')]\rangle\qquad(55.17)$$

是偏离平衡值的量度. 方程 (55.16) 的两项分别属于凝聚态和非凝聚态，至于交叉项(对 $\hat{\varphi}$ 为线性的)由于方程 (55.4) 而恒等于零. 作为推论，平均密度成为

$$n(\mathbf{x})=n_0(\mathbf{x})+n'(\mathbf{x}),\qquad(55.18)$$

这里

$$n_0(\mathbf{x})=|\Psi(\mathbf{x})|^2,\qquad(55.19)$$

$$n'(\mathbf{x})=-\mathcal{G}'(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau^+).\qquad(55.20)$$

$\mathcal{G}'$ 的方程可从方程 (55.15) 建立起来:

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\mathcal{G}'(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=-\hbar\delta(\tau-\tau')\langle[\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}\tau),\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau')]\rangle$$

$$-\left\langle T_\tau\left[\hbar\frac{\partial\hat{\varphi}_K(\mathbf{x}\tau)}{\partial\tau}\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau')\right]\right\rangle. \quad (55.21)$$

方程 (55.4) 表明右边的等时对易式成为 δ 函数，我们容易得到

$$\left\{-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-T(\mathbf{x})+\mu-\int d^3x''V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')|\Psi(\mathbf{x}'')|^2\right\}$$
$$\times\mathscr{G}'(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')-\int d^3x''V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')\Psi(x)$$
$$\times[\Psi^*(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'(\mathbf{x}''\tau,\mathbf{x}'\tau')+\Psi(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}''\tau,\mathbf{x}'\tau')]$$
$$=\hbar\delta(\tau-\tau')\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \quad (55.22)$$

这里 $\mathscr{G}'_{21}$ 是反常 Green 函数[比较方程 (20.14b) 和 (51.12b)]

$$\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')\equiv-\langle T_\tau[\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}\tau)\hat{\varphi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau')]\rangle. \quad (55.23)$$

很相似的计算给出另一方程

$$\left\{\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-T(\mathbf{x})+\mu-\int d^3x''V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')|\Psi(\mathbf{x}'')|^2\right\}$$
$$\times\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')-\int d^3x''V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')\Psi^*(\mathbf{x})$$
$$\times[\Psi(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}''\tau,\mathbf{x}'\tau')+\Psi^*(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'(\mathbf{x}''\tau,\mathbf{x}'\tau')]$$
$$=0, \quad (55.24)$$

这就完全解决了问题. 注意，Ψ 作为系数出现于方程 (55.22) 和 (55.24) 之中. 这情况类似于方程 (51.15) 和 (51.17) 中出现 Δ，但这里的自洽性比较简单，因为 Ψ 满足非耦合的方程 (55.9) 而不要求满足把 Δ 和 $\mathscr{T}$ 联系起来的自洽能隙方程[方程 (51.14)].

在通常的依赖于时间的系集的情况下，$\mathscr{G}'$ 和 $\mathscr{G}'_{21}$ 有 Fourier 表示

$$\begin{cases}\mathscr{G}'(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=(\beta\hbar)^{-1}\sum\limits_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\mathscr{G}'(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n),\\ \mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}\tau,\mathbf{x}'\tau')=(\beta\hbar)^{-1}\sum\limits_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n),\end{cases} \quad (55.25)$$

这里 $\omega_n = 2\pi n/\beta\hbar$ 适合于玻色子. 相应的运动方程成为

$$\left[i\hbar\omega_n + (2m)^{-1}\hbar^2\nabla^2 + \mu - \int d^3x'' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')|\Psi(\mathbf{x}'')|^2\right] \times \mathscr{G}'(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) - \int d^3x'' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')\Psi(\mathbf{x}) \times [\Psi^*(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'(\mathbf{x}'',\mathbf{x}',\omega_n) + \Psi(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}'',\mathbf{x}',\omega_n) = \hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \tag{55.26 a}$$

$$\left[-i\hbar\omega_n + (2m)^{-1}\hbar^2\nabla^2 + \mu - \int d^3x'' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')|\Psi(\mathbf{x}'')|^2\right] \times \mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega_n) - \int d^3x'' V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')\Psi^*(\mathbf{x}) \times [\Psi(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}'',\mathbf{x}',\omega_n) + \Psi^*(\mathbf{x}'')\mathscr{G}'(\mathbf{x}'',\mathbf{x}',\omega_n)] = 0. \tag{55.26 b}$$

虽然,对于任何特定的 Ψ,只要满足方程 (55.9),耦合方程原则上都可解出,但只有少数简单的情况是已详细研究过的.

均匀凝聚态

作为第一个例子,考虑有限温度下玻色子的稳定系集,这时凝聚态波函数是一个取决于温度的常数

$$\Psi(\mathbf{x}) = [n_0(T)]^{\frac{1}{2}}, \tag{55.27}$$

这就是$n_0(T)$的定义. 直接代入方程 (55.9) 给出化学势与凝聚态密度之间的下列关系式

$$\mu = n_0(T)V(0), \tag{55.28}$$

这里 $V(0) = V(\mathbf{k}=0)$. 此外,用 Fourier 变换可解出耦合积分微分方程 (55.26),因为系数是空间常数. 用通常的定义

$$\begin{cases} \mathscr{G}'(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\omega_n) = (2\pi)^{-3}\int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\mathscr{G}'(\mathbf{k},\omega_n), \\ \mathscr{G}'_{21}(\mathbf{x}-\mathbf{x}',\omega_n) = (2\pi)^{-3}\int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\mathscr{G}'_{21}(\mathbf{k},\omega_n), \end{cases} \tag{55.29}$$

简单的计算给出[比较方程 (51.28)]

$$\begin{cases}[i\hbar\omega_n - \varepsilon_k^0 - n_0V(\mathbf{k})]\mathcal{G}'(\mathbf{k},\omega_n) \\ \qquad - n_0V(k)\mathcal{G}'_{21}(\mathbf{k},\omega_n) = \hbar, \\ [-i\hbar\omega_n - \varepsilon_k^0 - n_0V(\mathbf{k})]\mathcal{G}'_{21}(\mathbf{k},\omega_n) \\ \qquad - n_0V(k)\mathcal{G}'(\mathbf{k},\omega_n) = 0, \end{cases} \tag{55.30}$$

这里 $\varepsilon_k^0 = \hbar^2k^2/2m$ 而且用到了方程(55.28). 这些代数方程容易解出:

$$\mathcal{G}'(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{-\hbar[i\hbar\omega_n + \varepsilon_k^0 + n_0V(k)]}{(\hbar\omega_n)^2 + E_k^2}$$

$$= \frac{u_k^2}{i\omega_n - E_k/\hbar} - \frac{v_k^2}{i\omega_n + E_k/\hbar}, \tag{55.31}$$

$$\mathcal{G}'_{21}(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{\hbar n_0V(k)}{(\hbar\omega_n)^2 + E_k^2}$$

$$= -u_kv_k\left[\frac{1}{i\omega_n - E_k/\hbar} - \frac{1}{i\omega_n + E_k/\hbar}\right], \tag{55.32}$$

这里 [见方程 (21.7) 到 (21.10)]

$$E_k = \{[\varepsilon_k^0 + n_0V(k)]^2 - [n_0V(k)]^2\}^{\frac{1}{2}}$$

$$= [(\varepsilon_k^0)^2 + 2n_0V(k)\varepsilon_k^0]^{\frac{1}{2}}, \tag{55.33}$$

$$v_k^2 = u_k^2 - 1 = \frac{1}{2}\left[\frac{\varepsilon_k^0 + n_0V(k)}{E_k} - 1\right], \tag{55.34 a}$$

$$u_kv_k = \frac{n_0V(k)}{2E_k}. \tag{55.34 b}$$

这里的理论十分类似于第 21 和 35 节的理论，因而大多数的评论这里同样适用. 特定地说，通常的向实频率的解析延拓，指 认出 E_k 为单粒子激发能，它的长波行为是，

$$E_k \approx \hbar ck \quad (k \to 0), \tag{55.35}$$

$$c = [n_0(T)V(0)m^{-1}]^{\frac{1}{2}}, \tag{55.36}$$

它表明 $V(0)$ 必须是正的. 还有，如果 E_k 对于一切 $\mathbf{k} \neq 0$ 都

是正的，则 Landau 临界速度是有限的；这样，非理想 Bose 气体是超流体，而理想 Bose 气体则不是，因为 c 和 v_c 恒等于零. 这是 Bogoliubov 原来的计算[1] 的最重要结论之一，因为它说明，排斥作用的存在怎样使谱在性质上有改变，并导致 $k \to 0$ 时的线性色散关系.

有意义的是，研究参数 n_0 和 n' 随温度的变化. 方程 (55.20) 和 (55.31) 的结合给出

$$n'(T) = -\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (\beta\hbar)^{-1} \times \sum_n \left(\frac{u_k^2}{i\omega_n - E_k/\hbar} - \frac{v_k^2}{i\omega_n + E_k/\hbar} \right) e^{i\omega_n \eta}$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\frac{u_k^2}{e^{\beta E_k} - 1} + \frac{v_k^2}{1 - e^{-\beta E_k}} \right), \qquad (55.37)$$

这里求和已用方程 (25.38) 算出，而参数 E_k，u_k 和 v_k 通过 $n_0(T)$ 而依赖于温度. 但在温度很低和相互作用很弱时，可在方程 (55.37) 中令 $n_0(T) \approx n_0(0)$. 简单的调整给出

$$n'(T) - n'(0) \approx \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(u_k^2 + v_k^2)|_{T=0}}{e^{E_k/k_BT} - 1}$$

$$\approx \frac{m}{12\hbar^3 c} (k_BT)^2 \quad (T \to 0),$$

这里 $n'(0)$ 是非凝聚态密度 [比较方程 (21.15)] 而 $c = [n_0(0)V(0)/m]^{\frac{1}{2}}$ 是声速，两者都是 $T = 0$ 时的. 既然总密度与温度无关，凝聚态的耗尽必然，遵守下列关系[2]

---

1) N. N. Bogoliubov, *J. Phys. (USSR)*, **11**:23(1947).

2) 如果右边第二项乘以因子 $n_0(0)/n$ (这因子在这模型中 ≈ 1) [见方程 (21.15) 和 (22.14)]，则所得方程正确地描写具有任意短程排斥势的 Bose 系统，只要将 c 解释为在 $T=0$ 的实际声速 [K. Kehr, *Z. Physik*, **221**:291 (1969)].

$$n_0(T) = n_0(0) - \frac{m}{12\hbar^3 c}(k_B T)^2 \quad (T \to 0). \quad (55.38)$$

这个方程也可用宏观凝聚体波函数表示为

$$1 - \frac{\Psi(T)}{\Psi(0)} = \frac{m(k_B T)^2}{24\hbar^3 c n_0(0)} \quad (T \to 0), \quad (55.39)$$

它表明Ψ的依赖于温度的部分按 T^2 变化. 此外，已经看到 $|\Psi|^2$ 总是小于 n，因为甚至在 $T = 0$，粒子间势也带来较高的 Fourier 分量.

有意义的是，将 $|\Psi(T)|^2$ 与超流体密度 $\rho_s(T)$ 作比较，$\rho_s(T)$ 可通过系统对外部微扰的线性响应来定义. Landau 准粒子模型预测[见方程 (54.25 a)]

$$1 - \frac{\rho_s(T)}{\rho} = \frac{2\pi^2\hbar}{45c\rho}\left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^4 \quad (T \to 0), \quad (55.40)$$

于是 $\rho_s(T = 0) = \rho$，其依赖于温度的改正项$\propto T^{4}$[1]. 这是很清楚的：在 $\rho_s(T)$ 和 $|\Psi(T)|^2$ 之间没有直接联系，因为这些物理量具有不同的温度依赖性，而且在 $T = 0$ 具有不同的数值(也见习题 14.9)[2]. 第 54 节已讨论了 $\rho_s(T)$ 的测量. $n_0(T)$ 的相应实验测量要困难得多；但还是有可能观察到温度在 T_λ 以下的 HeII 对高能中子($\approx$ 1 电子伏)的反常准弹性散射(见 17 节)[3].

非均匀凝聚态

现在转到空间不均匀系统，Ψ必须从非线性积分微分方程 (55.9) 决定. 写

---

1) 方程 (55.40) 和从方程 (54.19) 得到的声子比热 ($\propto T^3$) 已经从微观理论导出，直到微扰论的一切级. 分别见 K. Kehr, *Physica*, **33**:620 (1967) 和 W. Götze and H. Wagner, *Physica*, **31**:475(1965).

2) 在理想 Bose 气体的特殊情况中，这两个量重合；见习题 14.6 和 14.11.

3) P. C. Hohenberg and P. M. Platzman, *Phys. Rev.*, **152**:198(1966).

$$\Psi(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x})e^{i\varphi(\mathbf{x})} \tag{55.41}$$

常常是方便的，这里 F 和 φ 是实的. 既然总粒子流从下列关系式得出

$$j(\mathbf{x}) = \frac{-\hbar}{2mi}[(\nabla - \nabla')\mathcal{G}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau^+)]_{\mathbf{x}'=\mathbf{x}}, \tag{55.42}$$

凝聚态的贡献 $\mathbf{j}_0(\mathbf{x})$ 成为

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_0(\mathbf{x}) &= \frac{\hbar}{2m_i}[\Psi^*(\mathbf{x})\nabla\Psi(\mathbf{x}) - \Psi(\mathbf{x})\nabla\Psi^*(\mathbf{x})] \\ &= \frac{\hbar}{m}[F(x)]^2\nabla\varphi(\mathbf{x}) \\ &= n_0(\mathbf{x})\frac{\hbar}{m}\nabla\varphi(\mathbf{x}),\end{aligned} \tag{55.43}$$

这里 $n_0 = F^2$ 是凝聚态密度. 这个方程指认，凝聚态速度为[比较方程 (54.2)]

$$\mathbf{v}_0(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{m}\nabla\varphi(\mathbf{x}). \tag{55.44}$$

注意，只要$|\nabla\varphi|$是有界的，$\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$ 就自动是无旋的，因为$\mathbf{v}_0$正比于Ψ的周相的梯度. 如果假定Ψ为单值的，则方程 (55.44) 沿着完全在凝聚态中的闭合路径的线积分立即给出环流的量子化，其单位量子为 h/m [方程 (54.10)]，正如在方程(50.31)中一样.

为了简单，近似地用排斥的 δ 函数作为粒子间势，

$$V(\mathbf{x}) = g\delta(\mathbf{x}), \tag{55.45}$$

方程(55.9)就成为 Gross-Pitaevskii 方程[1]

---

1) 这个方程形式上等同于，T_c 附近有效的关于 $\rho^{\frac{1}{2}}$ 的 Ginzburg-Landau 型场方程 [V. L. Ginzburg and L. P. Pitaeskii, *Sov. Phys.-JETP*, **7**:858(1958)]，但物理解释是不同的. 在这方面，方程 (55.46) 的最早的研究见 E.P.Gross, *Nuovo Cimento*, **20**:454(1961) 和 L. P.Pitaevskii, *Sov. Phys.-JETP*, **13**:451(1961).

$$\left(\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+\mu\right)\Psi(\mathbf{x})-g|\Psi(\mathbf{x})|^2\Psi(\mathbf{x})=0. \quad (55.46)$$

如将方程 (55.41) 代入 (55.46)，虚部和实部可写为

$$\nabla\cdot\left(F^2\frac{\hbar\nabla\varphi}{m}\right)=\nabla\cdot\mathbf{j}_0=0 \quad (55.47)$$

$$\frac{\mu}{m}=\frac{F^2g}{m}-\frac{\hbar^2}{2m^2F}\nabla^2F+\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar\nabla\varphi}{m}\right)^2$$

$$=\frac{F^2g}{m}-\frac{\hbar^2}{2m^2F}\nabla^2F+\frac{1}{2}\mathbf{v}_0^2. \quad (55.48)$$

容易认出这些方程是凝聚态的连续性方程以及稳恒流动的 Bernoulli 方程的量子类比.

作为非均匀系统的一个例子，考虑限制在半无限区 ($z>0$) 的稳定凝聚态. 边界条件取为，在 $z=0$，$\Psi=0$，因为方程 (55.46) 类似于单粒子 Schrödinger 方程. 在这种一维几何关系中，Ψ 的形式为

$$\Psi(\mathbf{x})=n_0^{\frac{1}{2}}f(z), \quad (55.49)$$

这里实函数 f 满足如下方程[见方程 (55.46)]

$$\frac{\hbar^2}{2mn_0g}\frac{d^2f}{dz^2}+\frac{\mu}{n_0g}f-f^3=0. \quad (55.50)$$

选择归一化，使当 $z\to\infty$ 之时 $f\to1$，方程 (55.50) 的渐近行为给出

$$\mu=n_0g, \quad (55.51)$$

正像在方程 (55.28) 中那样. Ψ 的空间变化的自然标尺长度由下式给出[比较 (50.18)]

$$\xi=\left(\frac{\hbar^2}{2mn_0g}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (55.52)$$

而方程 (55.50) 的正规解已在方程 (50.20) 中得到，

$$f(z) = \tanh \frac{z}{\sqrt{2}\xi}. \tag{55.53}$$

这样，凝聚态密度在壁上为零，而在经过一个特征长度 ξ 后就上升到它的渐近值 n_0. 有意义的是这同一个长度也出现于具有 δ 函数势的均匀系统中 [见方程 (21.14)]，因为激发谱 E_k 在值 $k \approx \xi^{-1}$ 从线性的变为二次的.

为探查方程(55.53)的含意，我们计算与形成表面层的过程相联系的每单位面积能量 σ. 包含在大的范围 $0 < z < L$ 中的每单位面积凝聚态粒子数由方程 (55.19) 给出[1)]

$$\begin{aligned} N_0 &= n_0 \int_0^L dz \tanh^2 \frac{z}{\sqrt{2}\xi} \\ &= n_0 \int_0^L dz \left(1 - \operatorname{sech}^2 \frac{z}{\sqrt{2}\xi}\right) \\ &\approx n_0 L - n_0 \sqrt{2}\xi, \end{aligned} \tag{55.54}$$

这里假定 L 为远大于 ξ. 类似地，每单位面积总的凝聚态能量成为[见方程 (55.6)]

$$\begin{aligned} E_0 &= \int_0^L dz \left(-\Psi^* \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi + \frac{1}{2} g |\Psi|^4\right) \\ &= \frac{1}{2} n_0^2 g \int_0^L dz \left(1 - \operatorname{sech}^4 \frac{z}{\sqrt{2}\xi}\right) \\ &\approx \frac{1}{2} n_0^2 g L - \frac{1}{3} n_0^2 g \xi \sqrt{2}. \end{aligned} \tag{55.55}$$

这能量大部分来自粒子间的排斥，并且也出现于均匀系中. 所以，我们把表面能 σ 定义为总能量 E_0 与同样数目的粒子均匀分布时的能量之差，

---

1) 长度 L 在这里是作为一种数学上的截断，并没有物理意义，但同一计算也描写宽度 $2L \gg \xi$ 的实际通道，因为所得的 $\Psi(x)$ 是对称的.

$$\sigma = E_0 - \frac{1}{2} N_{0g}^2 g L^{-1}$$

$$\approx \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{\hbar^2 n_0}{m\xi} \approx \frac{\rho \kappa c}{3\pi}, \qquad (55.56)$$

这里用了方程 (55.54) 中的 N_0，并在最后一行中令 $mn_0 \approx mn = \rho$. 这表面能既包含与波函数曲率相联系的 (正的) 动能，也包含把粒子从表面移到流体体积中去的(正的)压缩功，在体积中粒子密度稍高些. 虽然这里的模型只适用于表面层远厚于粒子间距的情况 ($n\xi^3 \gg 1$)，但即使对于强相互作用系统 $n\xi^2 \approx 1$，方程 (55.56) 的最后形式仍然有确定意义. 用适合于 He II 的数值，求得 $\sigma \approx 0.36$ 尔格/厘米^2，它与观测到的低温表面张力 ≈ 0.34 达因/厘米 $= 0.34$ 尔格/厘米^2 符合得很好.

作为非均匀系统的第二个例子，考虑形式为

$$\Psi(x) = n_0^{\frac{1}{2}} e^{i\theta} f(r) \qquad (55.57)$$

的无界凝聚态，[1]这里 (r, θ) 是平面极坐标，$f(r)$ 是实的，并且于 $r \to \infty$ 时趋于 1. 方程 (55.44) 立刻给出

$$\mathbf{v}_0(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{mr} \hat{\theta}, \qquad (55.58)$$

这样，方程(55.57)代表单一量子化涡旋，环流为 h/m [见方程 (54.8)]. Gross-Pitaevskii 方程归结为

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2} \right) f + \mu f - n_0 g f^3 = 0, \qquad (55.59)$$

它的渐近行为再次导至方程 (55.51). 引入无量纲变数 $\zeta = r/\xi$ 是方便的:

$$\frac{d^2 f}{d\zeta^2} + \frac{1}{\zeta} \frac{df}{d\zeta} - \frac{1}{\zeta^2} f + f - f^3 = 0. \qquad (55.60)$$

---

1) V. L. Ginzburg and L. P. Pitaevskii, 前引文; E. P. Gross, *Nuovo Cimento*, 前引文; L. P. Pitaevskii, 前引文.

对于小 ζ，离心坒支配着解，解取形式

$$f(\zeta) = C\zeta \quad (\zeta \ll 1), \tag{55.61}$$

这里 C 是数值常数. 结果表明，粒子密度在半径为 ξ 的区域中降到零，这区域可解释为涡旋核. 为澄清这结果，把方程 (55.36) 和 (55.52) 结合起来给出

$$c = \frac{\kappa}{2\pi\sqrt{2\xi}}, \tag{55.62}$$

表明核半径 ξ 可解释为这样的点，在那里环行着的超流体速度成为可与声速相比[见方程 (54.8)]. 这判据与势的强度无关；对于 HeII 方程 (55.62) 给出 $\xi \approx \frac{1}{2}$ 埃，粗略地与观测值≈ 1 埃相符[1].

对于大 ζ，用 ζ^{-2} 的幂展开给出

$$f(\zeta) \sim 1 - (2\zeta^2)^{-1} \quad (\zeta \to \infty). \tag{55.63}$$

注意密度微扰在这里代数式地变为零，而不是像半无限区的情况那样指数式地变为零；这差别是来自围绕涡旋的长程环流速度场. 严格的解 $f(\zeta)$ 必须用数值方法得出(图 55.1)，而联系于涡旋的每单位长度能量 E_v 的相应数值计算给出[2]

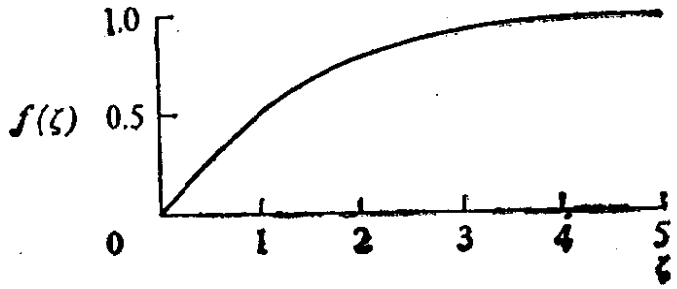


图 55.1 单一量子化涡旋的径向波函数. 曲线是按照方程 (55.60) 的数值解描画的，数值解见 M. P. Kawatra and R. K. Pathria, *Phys. Rev.*, **151**:132(1966).

1) G. W. Rayfield and F. Reif, 前引文.

2) V. L. Ginzburg and L.P. Pitaevskii, 前引文; L.P.Pitaevskii, 前引文.

$$E_v = \frac{\pi\hbar^2 n_0}{m}\ln\frac{1.46R}{\xi}$$

$$\approx \frac{\rho\kappa^2}{4\pi}\ln\frac{1.46R}{\xi}. \qquad (55.64)$$

这里的 R 是在大距离处的截断，它可解释为容器的半径. 在最后的形式中再次取 $n_0 \approx n$. 这个式子类似于经典涡旋(54.11)，但核区现在有确定意义，而不依赖于特定的模型. 量 E_v 决定转动 HeII 柱中量子化涡旋形成的临界角速度(习题 14.3). 对于 $R \approx 1$ 毫米，实验[1] 证实 $\ln(R/\xi) \approx 16$.

习　　题

14.1　用 Clausius-Clapeyron 方程讨论图 54.1 中的 He^3 和 He^4 的熔化曲线. 据观测，居里定律描写固态 He^3 的导磁率，温度可低到 0.01 K 的数量级. 试基于此观测结果设计 He^3 熔化曲线极小值的理论. 当 $T \to 0$，这熔化曲线将发生什么变化?

14.2　(a) 如 $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \omega\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{r}$，试证 $\mathrm{curl}\,\mathbf{v} = 2\omega\hat{\mathbf{z}}$. 由此推出 $\oint_C d\mathbf{l}\cdot\mathbf{v} = 2\omega A$，其中 $A = \int d\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{z}}$ 是迴路 C 所包围的面积.

(b) 如 $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = (\kappa/2\pi r)\hat{\theta}$，试证 $\mathrm{curl}\,\mathbf{v} = \kappa\hat{\mathbf{z}}\delta(\mathbf{r})$，这里 $\mathbf{r}$ 是 xy 平面中的二维矢量. 由此证明 $\oint_C d\mathbf{l}\cdot\mathbf{v} = \kappa N_C$，其中 N_C 是包围在 C 中的涡旋数，并验证方程 (54.8) 后面的讨论.

14.3　设系统的转动角速度为 ω.

(a) 试证平衡状态由"自由能" $F - \omega L$ 取极小值而定，这里 L 为角动量而 F 是 Helmholtz 能.

(b) 对于半径为 R 的转动圆柱中的超流体，证明产生单

1) G. B. Hess and W. M. Fairbank, *Phys. Rev. Letters*, **19**:216(1967).

个涡旋的临界角速度 ω_{c1} 由 $\omega_{c1}=(\kappa/2\pi R^2)\ln(R/\xi)$ 给出，这里 ξ 是核的半径. 将你的计算与习题13.5比较. 为什么超导电体中的量子化磁通线可以解释为环流为 $\hbar/2m_e$ 的涡旋?

14.4 N 个经典粒子的系统，总能量为 E，总的质心动量为 $\mathbf{P}$. 在这些约束下使熵取极大，并推导平衡分布函数 $f(\epsilon-\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v})$，这里 $f(\epsilon)$ 是通常的 Boltzmann 分布函数，而 $\mathbf{v}$ 是 Lagrange 乘子. 计算 $\partial\epsilon/\partial\mathbf{k}$ 的系综平均并由此求出 $\mathbf{v}$[1].

14.5 推导声子和旋子的密度 [方程 (54.19 a) 和 (54.20 a)]，并求对于自由能、比热以及正常流体密度 ρ_n [方程 (54.25)] 的相应贡献.

14.6 用方程 (54.23) 证明，对于任意的无相互作用非相对论气体，都有 $\rho_n=\rho$，除非是温度在转变温度 T_0 以下的理想 Bose 气体，这时 $\rho_n=\rho(T/T_0)^{\frac{3}{2}}$.

14.7 考虑均匀背景中的稠密带电 Bose 气体，其激发谱是 $\epsilon_k=[(\hbar\Omega_{pl})^2+(\hbar^2k^2/2m_B)^2]^{\frac{1}{2}}$ (习题 6.5 和 10.2). 用 Landau 准粒子模型证明，低温下的临界速度和正常流体密度由下列式子给出

$$v_c=1.32\,r_s^{-\frac{3}{4}}\frac{e^2}{\hbar},$$

$$\frac{\rho_n}{\rho}\approx 0.360\,r_s^{\frac{9}{8}}\left(\frac{2a_0k_BT}{e^2}\right)^{\frac{1}{4}}\times\exp\left(-3.46\,r_s^{-\frac{3}{4}}\frac{e^2}{2a_0k_BT}\right)\quad(T\to 0),$$

这里 $n=3/4\pi r_s^3a_0^3$，$a_0=\hbar^2/m_Be^2$ 是 Bohr 半径，而 $e^2/\hbar$ 是最低 Bohr 轨道上的速度. 如 $m_B\approx m_{\mathrm{He}}$，讨论所牵涉的各个数值.

---

1) F.London "Superfluids," vol.II, pp.95—96, Dover Publications, Inc. New York, 1964.

14.8 (a) 证明温度在转变温度以下的理想 Bose 气体的单粒子 Green 函数，由下式给出

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_m) = -(2\pi)^3\beta\hbar n_0\delta(\mathbf{k})\delta_{m0} + (i\omega_m - \varepsilon_k^0/\hbar)^{-1}.$$

(b) 用方程(25.25)和 (26.10) 重新推导第 5 节的结果.

14.9 考虑弱相互作用 Bose 气体，其中有以速度 $\mathbf{v}$ 运动的均匀凝聚体.

(a) 证明，$\Psi(\mathbf{x}) = n_0^{\frac{1}{2}} e^{im\mathbf{v}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$，并从方程 (55.9) 求解 μ.

(b) 用 $\Psi(\mathbf{x})$ 的这个式子，从方程 (55.26) 解 $\mathcal{G}'$ 和 $\mathcal{G}'_{21}$. 与习题 6.6 所得的解比较.

(c) 试证在 $T = 0$，对于 Bogoliubov 激发谱 E_k，直到 v 超过 Landau 临界速度之前，n' 不改变. 在有限温度，证明方程 (55.38) 右边第二项乘上了 $(1 - v^2/c^2)^{-1}$.

(d) 用 $\mathcal{G}'$ 表出总动量密度 $V^{-1}\langle\mathbf{p}\rangle$. 展开到 $\mathbf{v}$ 的第一级，并验证 $V^{-1}\langle\mathbf{p}\rangle = [\rho - \rho_n(T)]\mathbf{v}$，这里 ρ_n 由 Landau 表示式 (54.23) 给出. 对于 $T \to 0$，计算 $\rho_n(T)$ 并与方程 (54.25 a) 比较.

(e) 对这系统重作习题 13.13.

14.10 (a) 试为弱相互作用 Bose 气体中矩阵 Green 函数 $\mathcal{G}'(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \equiv -\langle T_\tau[\hat{\Phi}_K(\mathbf{x}\tau)\hat{\Phi}_K^\dagger(\mathbf{x}'\tau')]\rangle$ 推导其余的运动方程 [比较方程 (20.18)，(55.22) 和 (55.24)].

(b) 对这个系统重复习题 13.15 的计算，并将你的结果与超导电体的结果比较. 归一化条件现在必须写成

$$\int d^3x(|u_j^{(\pm)}|^2 - |v_j^{(\pm)}|^2) = \pm 1,$$

这 $\pm$ 指能量本征值的符号.

14.11 用第 52 节发展的方法研究凝聚的无相互作用带电 Bose 气体对横向矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{x}t)$ 的线性响应. 在长波静态

极限下，证明，感生电流遵守 London 方程 (49.29) 而具有依赖于温度的系数 $n_s(T)/n = 1 - (T/T_0)^{\frac{3}{2}}$ (比较习题 14.6)，并因而出现了 Meissner 效应[1].

14.12 (a) 把习题 14.11 推广到均匀背景中的稠密的相互作用的带电 Bose 气体. 利用方程 (51.6) 的类比推导修订的 London 方程，它具有依赖于温度的系数

$$\frac{n_s(T)}{n} = \frac{\rho_s(T)}{\rho} = 1 - \frac{\rho_n(T)}{\rho},$$

这里 $\rho_n(T)/\rho$ 由习题 14.7 给出.

(b) 在高密度和零温度下，证明电动力学是定域的，除开 $r_s^{\frac{3}{4}}$ 级的改正在外.

14.13 就宽度 d 的通道中的稳定凝聚态求解方程 (55.46)，并讨论极限情况 $d \gg \xi$ 和 $d \ll \xi$ 之间的过渡. 将所得的密度轮廓曲线与理想 Bose 气体作比较. 假定 $N_0 \approx N$，这忽略了非凝聚态，并取 $N \propto d$.

14.14 考虑半无限区 ($z > 0$)，凝聚态以速度 $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{x}}$ 在其中作匀速流动. 假定在无限远的渐近密度由习题 14.9 的无限介质的结果给出，从方程(55.46)求解 $\Psi(z)$. 讨论 $n_0(z)$ 怎样随 v 变化.

14.15 证明 Ψ 的方程(55.46)可以从能量变分原理得出，凝聚态粒子数保持固定. 作为特例，考虑无限介质中的半径为 R 的刚性球，凝聚态波函数在介质中取形式 $\Psi(\mathbf{x}) = n_0^{\frac{1}{2}} f(r)$ 而 $f(R) = 0$ 且 $f(\infty) = 1$. 用尝试函数 $f(r) = 1 - e^{-(r-R)/l}$，并确定有效表面厚度 l. 在 $R \to \infty$ 的极限中，证明 $l = (6\hbar^2/11mn_0g)^{\frac{1}{2}}$ 以及相应的表面能成为 $\sigma = 0.479\,\hbar^2 n_0/m\xi$ [比较

1) V. L. Ginzburg, *Usp. Fiz. Nauk*, **48**:25 (1952) [德文译文: *Fortsch. Phys.*, **1**:101(1953)]; M. R. Schafroth, *Phys. Rev.*, **100**:463(1955).

方程 (55.56)].

14.16　用习题 14.15 的变分原理研究凝聚态中的涡旋. 假定径向函数的形式为 $f(r)=r(r^2+l^2)^{-\frac{1}{2}}$，证明 $l^2=2\xi^2$ 是最佳选择. 由此推导近似结果 $E_v=(\pi\hbar^2n_0/m)\ln(1.497R/\xi)$ 并与方程 (55.64) 比较.

第十五章　对有限系统的应用：原子核

有限的相互作用系统远比均匀介质复杂．的确，对于有限系统，仅仅建造 Hatree-Fock 波函数就是一项重要工作；而在均匀介质中，平移不变性的要求决定了这些波函数只能是平面波（见第 10 节）．

由于在单粒子态中出现了这样一个困难问题，多体技术的任何实际应用必然远远不及前面的讨论那样细致．尽管这样，我们将看到，二次量子化、正则变换、Green 函数以及独立对偶近似也为讨论有限的多粒子系集提供了有力工具．

为确定起见，我们集中讨论原子核，但是同样的技巧也适用于原子和分子．因而，我们把由核子-核子力的奇异本性所引起的特殊问题推迟到本章最后一节．

对于有限系集，角动量起着关键作用，附录 B 给出这方面的简短综述[1]．总哈密顿函数的旋转不变性意味着所有本征态都可用 $|JM\rangle$ 标记[2]．此外，本征态还用它们的宇称 π 标记，因为强相互作用在反演变换中的不变性意味着宇称也是一个好的量子数．

---

1) 我们采用 A. R. Edmonds, "Angular Mo. mentum in Quantum Mechanics", Princeton University Press, Princeton, N- J. 1957 一书的角动量记号．

2) 严格的本征态，可用质心动量 $\mathbf{P}_{cm}$ 和质心系中的角动量 $|JM\rangle$ 表征，但对 $\mathbf{P}_{cm}$ 的依赖关系将不是显式的［然而可参看习题 15.18］．我们将一般地研究围绕重的惰性核心运动的价核子的行为．于是，作为一个好的近似，可以认为总质心与核心的中心重合．

56. 变到粒子与空穴的一般正则变换

作为开始，我们进行一个变到粒子和空穴的一般正则变换．在第一近似下，假定核心的基态（见图 56.1）是完全填满的单粒子能级的集合（稍后一点我们就来规定这一集合的有关性质）．对于球对称系统，这些单粒子态总可以用量子数 $|\alpha\rangle \equiv |nlsjm_j\rangle$ 来表征[1]，其中 $s=\frac{1}{2}$，$j=\left|l\pm\frac{1}{2}\right|$．这些态的宇称是 $(-1)^l$．利用记号

$$|\alpha\rangle \equiv |a, m_\alpha\rangle, \tag{56.1 a}$$

和

$$|-\alpha\rangle \equiv |a, -m_\alpha\rangle, \tag{56.1 b}$$

使其明显地表示出对 m 的依赖关系，这是方便的．这里 $\{a\}$ 表示量子数 $\{nlsj\}$．假定用一个数 F 来编排单粒子量子数，这里 F 是在最后一个完全被占据的态和第一个未被占据（或部分被占据）的态之间的一个数，如图 56.1 所示．

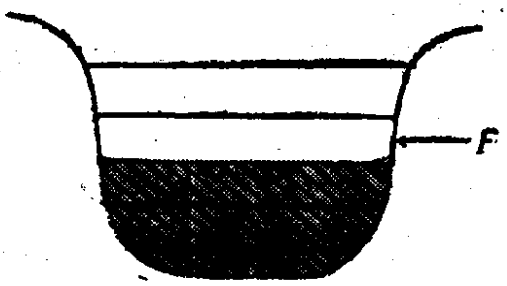


图 56.1　核心的 Hartre-Fock 基态。

如果用 $c_\alpha^\dagger$ 和 c_α 表示一般费米子的产生算符和消灭算符，则粒子和空穴算符可用下列关系式定义，

1）为清楚起见，我们先假定系统只由一种类型的费米子组成．核子的同位旋将导致小的修改．这将在本节末加以讨论

$$a_\alpha^\dagger \equiv c_\alpha^\dagger \qquad (\alpha > F) \tag{56.2 a}$$

$$b_{\bar{\alpha}}^\dagger \equiv S_{-\alpha} c_{-\alpha} \quad (\alpha < F), \tag{56.2 b}$$

这里采用了关于周相的约定

$$S_\alpha \equiv (-1)^{j_\alpha - m_\alpha}. \tag{56.3}$$

显然，这是一个正则变换，因为它保持反对易规则不变，

$$\begin{cases} \{a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger\} = \{b_\alpha, b_{\alpha'}^\dagger\} = \delta_{\alpha\alpha'}, \\ \text{所有其他反对易式} = 0. \end{cases} \tag{56.4}$$

方程 (56.2 b) 中与 m 有关的周相，保证了算符 $b_\alpha^\dagger$ 产生一个角动量为 $|j_\alpha m_\alpha\rangle$ 的空穴. 要证明这一点，只须证明 $b_\alpha^\dagger$ 是一个秩数为 j_α 的不可约张量算符，而以 m_α 标记各分量. 首先需要构成系统的角动量算符

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} &= \sum_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger \langle \alpha | \mathbf{J} | \beta \rangle c_\beta \\ &= \sum_{nljmm' > F} a_{nljm}^\dagger \langle jm | \mathbf{J} | jm' \rangle a_{nljm'} \\ &\quad + \sum_{nljmm' < F} \langle jm | \mathbf{J} | jm' \rangle (-1)^{j-m} b_{nlj,-m} \\ &\quad \times (-1)^{j-m'} b_{nlj,-m'}^\dagger, \end{aligned} \tag{56.5}$$

式中第二行是因为 $\mathbf{J}$ 的单粒子矩阵元对 $\{nlj\}$ 是对角的，且与 n 和 l 无关. 最后两个算符可以写成

$$\begin{aligned} &(-1)^{j-m} b_{nlj,-m} (-1)^{j-m'} b_{nlj,-m'}^\dagger \\ &\quad = (-1)^{m-m'} (\delta_{mm'} - b_{nlj,-m'}^\dagger b_{nlj,-m}), \end{aligned}$$

而括号中第一项对方程 (56.5) 没有贡献，这是因为

$$\sum_m \langle m | \mathbf{J} | m \rangle = \hat{z} \sum_m m = 0.$$

此外，Wigner-Eckart 定理表明 J_{1q} 的矩阵元满足[1]

---

1) 我们采用附录 B 中所讨论的一般张量记号 T_{KQ}.

$$\langle jm|J_{1q}|jm'\rangle = (-1)^{m'-m+1}\langle j,-m'|J_{1q}|j,-m\rangle.$$

交换求和变量（m，$m' \to -m', -m$），角动量算符最后成为

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_{njmm'>F} a^{\dagger}_{nljm}\langle jm|\mathbf{J}|jm'\rangle a_{nljm'} + \sum_{nljmm'<F} b^{\dagger}_{nljm}\langle jm|\mathbf{J}|jm'\rangle b_{nljm'}. \tag{56.6}$$

由下述关系立即得到 $b^{\dagger}_{\alpha}$ 是张量算符的证明：

$$\begin{aligned}[\hat{\mathbf{J}}, b^{\dagger}_{\alpha m_\alpha}] &= \sum_{\beta\gamma}\langle\beta|\mathbf{J}|\gamma\rangle[b^{\dagger}_{\beta}b_{\gamma}, b^{\dagger}_{\alpha}] \\ &= \sum_{\beta\gamma}\langle\beta|\mathbf{J}|\gamma\rangle\delta_{\alpha\gamma}b^{\dagger}_{\beta} \\ &= \sum_{m'_\alpha}\langle j_\alpha m'_\alpha|\mathbf{J}|j_\alpha m_\alpha\rangle b^{\dagger}{}_{\alpha m'_\alpha},\end{aligned} \tag{56.7}$$

它们就用来定义这种算符.

这样，变换到粒子与空穴的一般正则变换可以写成

$$c_\gamma = \theta(\gamma - F)a_\gamma + \theta(F-\gamma)S_\gamma b^{\dagger}_{-\gamma}, \tag{56.8 a}$$

$$c^{\dagger}_{\gamma} = \theta(\gamma - F)a^{\dagger}_{\gamma} + \theta(F-\gamma)S_\gamma b_{-\gamma}. \tag{56.8 b}$$

下一步工作是，把总哈密顿函数写成关于新粒子和空穴的算符的正规编序形式：

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta}c^{\dagger}_{\alpha}\langle\alpha|T|\beta\rangle c_\beta + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}c^{\dagger}_{\alpha}c^{\dagger}_{\beta}\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle c_\delta c_\gamma. \tag{56.9}$$

正像在第 37 节中那样，Wick 定理可以简化计算. 我们写出

$$N(c^{\dagger}_{\alpha}c_\beta) + c^{\dagger}_{\alpha}c_\beta \equiv c^{\dagger}_{\alpha}c_\beta, \tag{56.10}$$

这里 N 表示关于新算符的正规编序. 相对于由

$$a_\alpha|0\rangle = b_\alpha|0\rangle = 0 \tag{56.11}$$

定义的新的真空（即图 56.1 所示的近似核心基态）取方程 (56.10) 的矩阵元. 我们得到

$$c_a^{\dagger\cdot}c_\beta^{\cdot} = \langle 0|c_a^\dagger c_\beta|0\rangle = \theta(F-\alpha)\delta_{\alpha\beta}, \tag{56.12}$$

而其他收缩为零，

$$c_a^{\dagger\cdot}c_\beta^{\dagger\cdot} = c_a^{\cdot}c_\beta^{\cdot} = 0. \tag{56.13}$$

现在可用 Wick 定理计算出方程 (56.9) 中出现的各量:

$$c_\alpha^\dagger c_\beta = \delta_{\alpha\beta}\theta(F-\alpha) + N(c_\alpha^\dagger c_\beta), \tag{56.14}$$

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma = {} & (\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})\theta(F-\alpha)\theta(F-\beta) \\ & + 2\delta_{\alpha\gamma}\theta(F-\alpha)N(c_\beta^\dagger c_\delta) \\ & - 2\delta_{\alpha\delta}\theta(F-\alpha)N(c_\beta^\dagger c_\gamma) \\ & + N(c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma), \end{aligned} \tag{56.15}$$

这里利用对称性 $\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle = \langle\beta\alpha|V|\delta\gamma\rangle$，把对指标 $\alpha\beta\gamma\delta$ 求和后贡献相同的各项合并了起来.

把方程 (56.14) 和 (56.15) 代进方程(56.9)的时候，哈密顿函数分解为一个 c 数部分，一个包含$N(c^\dagger c)$的部分，以及一个包含 $N(c^\dagger c^\dagger cc)$ 的部分. 虽然这个结果对于任意一组单粒子态都是正确的，我们还是选择特定的一组态，它使变换后的哈密顿函数的二次项部分成为对角的. 简单的计算给出条件

$$\begin{aligned} & \langle\beta|T|\delta\rangle + \sum_{\alpha<F}[\langle\alpha\beta|V|\alpha\delta\rangle - \langle\alpha\beta|V|\delta\alpha\rangle] \\ & = \varepsilon_\beta\delta_{\beta\delta}, \end{aligned} \tag{56.16}$$

这正好是用第 10 节的 Hartree-Fock 单粒子方程导出的能量本征值方程. 因而，如果单粒子波函数 φ 满足[1)]

$$\begin{aligned} & T\varphi_\delta(2) + \sum_{\alpha<F}\Big[\int \varphi_\alpha(1)^\dagger V(1,2)\varphi_\alpha(1)\varphi_\delta(2)d^3x_1 \\ & - \int\varphi_\alpha(1)^\dagger V(1,2)\varphi_\delta(1)\varphi_\alpha(2)d^3x_1\Big] = \varepsilon_\delta\varphi_\delta(2), \end{aligned} \tag{56.17}$$

则总哈密顿函数取如下形式

1) 注意，对应于不同能量的解是正交的，而简并态总是可以正交化的.

$$\hat{H} = H_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \tag{56.18}$$

其中

$$H_0 = \sum_{\alpha<F}\left(T_\alpha + \frac{1}{2}V_\alpha\right), \tag{56.19}$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{\alpha>F}\varepsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha - \sum_{\alpha<F}\varepsilon_\alpha b_{-\alpha}^\dagger b_{-\alpha}, \tag{56.20}$$

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle N(c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma). \tag{56.21}$$

在这些方程中，能量本征值由下式给出，

$$\varepsilon_\alpha = T_\alpha + V_\alpha, \tag{56.22}$$

其中

$$T_\alpha \equiv \langle\alpha|T|\alpha\rangle, \tag{56.23}$$

$$V_\alpha \equiv \sum_{\beta<F}[\langle\alpha\beta|V|\alpha\beta\rangle - \langle\alpha\beta|V|\beta\alpha\rangle]. \tag{56.24}$$

这个一般结果并不限于球状系统；只要 $\{\alpha\}$ 代表规定 Hartree-Fock 方程 (56.17) 和 (56.22) 的解的一组单粒子量子数，这个结果总是适用的. 然而在这里所考虑的所有情况下，Hartree-Fock 核心的转动不变性意味着相应的单粒子能量与 m 无关，即 $T_\alpha = T_a$，$V_\alpha = V_a$，以及 $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_a$.

方程 (56.18) 到 (56.21) 是原来的哈密顿函数即方程 (56.9) 的一个准确变换式. 对于几乎一切目的，$H_0 + \hat{H}_1$ 为多体计算提供了较好的起点，因为它已经包含了一个粒子与核心中诸粒子的平均相互作用. 新哈密顿函数还具有更进一步的优点，即 $H_0 + \hat{H}_1$ 显然是对角的，并且 $\langle 0|\hat{H}_2|0\rangle$ 为零.

这里的讨论可以直接应用于原子，其中与原子核之间的库仑相互作用可以合并到单体算符 T 中. 然而，对于原子核问题，由于原子核既包含有质子，又包含有中子，前面的处理

必须稍加推广．在这种情况下，象在第 40 节中所讨论的，量子数集合 $\{\alpha\}$ 完全可以扩充到包括核子的同位旋．因而对于球状原子核，我们定义

$$|\alpha\rangle \equiv |nl\frac{1}{2}jm_j;\quad \frac{1}{2}m_t\rangle \qquad \text{(原子核)}, \qquad (56.25)$$

这里对于质子(中子) $m_t = +\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)$．方程 (56.3) 中的周相 S_α 也必须推广为

$$S_\alpha \equiv (-1)^{j_\alpha - m_\alpha}(-1)^{\frac{1}{2}-m_{t\alpha}} \qquad \text{(原子核)}, \qquad (56.26)$$

因而，对于同位旋，$b_\alpha^\dagger$ 也是一个 1 / 2 秩的张量算符（其证明可以完全仿照角动量的情况进行）．用这种扩充了的基，方程 (56.18) 到 (56.24) 同样适用于有限核．

57. 单粒子壳层模型

求解有限系统的 Hartree-Fock 方程是极其困难的，幸运的是，有限核的大多数性质都可以用近似的，可解的单粒子势来理解，我们现在讨论两个特例．

有心势中的近似 Hartree-Fock 波函数与能级编序

先考虑最简单的单粒子势：即是图 57.1 所示的无限方阱．Schrödinger 方程的在原点为有限的解是

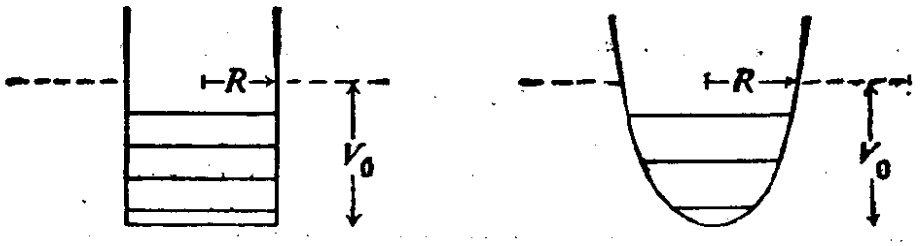


图 57.1 单粒子 Hartree-Fock 势的方阱近似与谐振子近似．

$$\Psi_{nlm} = N_{nl} j_l(kr) Y_{lm}(\Omega_r), \tag{57.1}$$

其能量为

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0. \tag{57.2}$$

在边界上，波函数应为零，$j_l(kR) = 0$，这给出本征值谱

$$k_{nl} R = X_{nl}, \tag{57.3}$$

这里 X_{nl} 是 l 阶球Bessel函数的第 n 个零点，不包括原点，但包括边界上的零点在内. 这些零点的顺序示于图 57.2 的右边. 归一化积分可以算出[1)]

$$N_{nl}^2 = \frac{2}{R^3} \frac{1}{j_{l+1}^2(X_{nl})}. \tag{57.4}$$

它给出一组近似的单粒子波函数.

第二个简单的可解势是谐振子. 我们把势写成（见图 57.1）

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2\right] \\ &= -V_0 + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2, \\ \frac{V_0}{R^2} &\equiv \frac{1}{2} m\omega^2, \end{aligned} \tag{57.5}$$

并寻找 Schrödinger 方程的如下形式的解

$$\Psi_{nlm} = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\Omega_r). \tag{57.6}$$

于是，径向波函数 $u_{nl}(r)$ 满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - (\varepsilon_{nl} + V_0)\right] u_{nl}(r) = 0, \tag{57.7}$$

---

1) 这个结果可由下面这本书中的关系式得到： L. I. Schiff, "Quantum Mechanics", 3d, ed., p. 86, McGraw-Hill Book Company, New York. 1968.

其解为 Laguerre 多项式[1)]

$$n = 1, 2, \cdots \infty$$

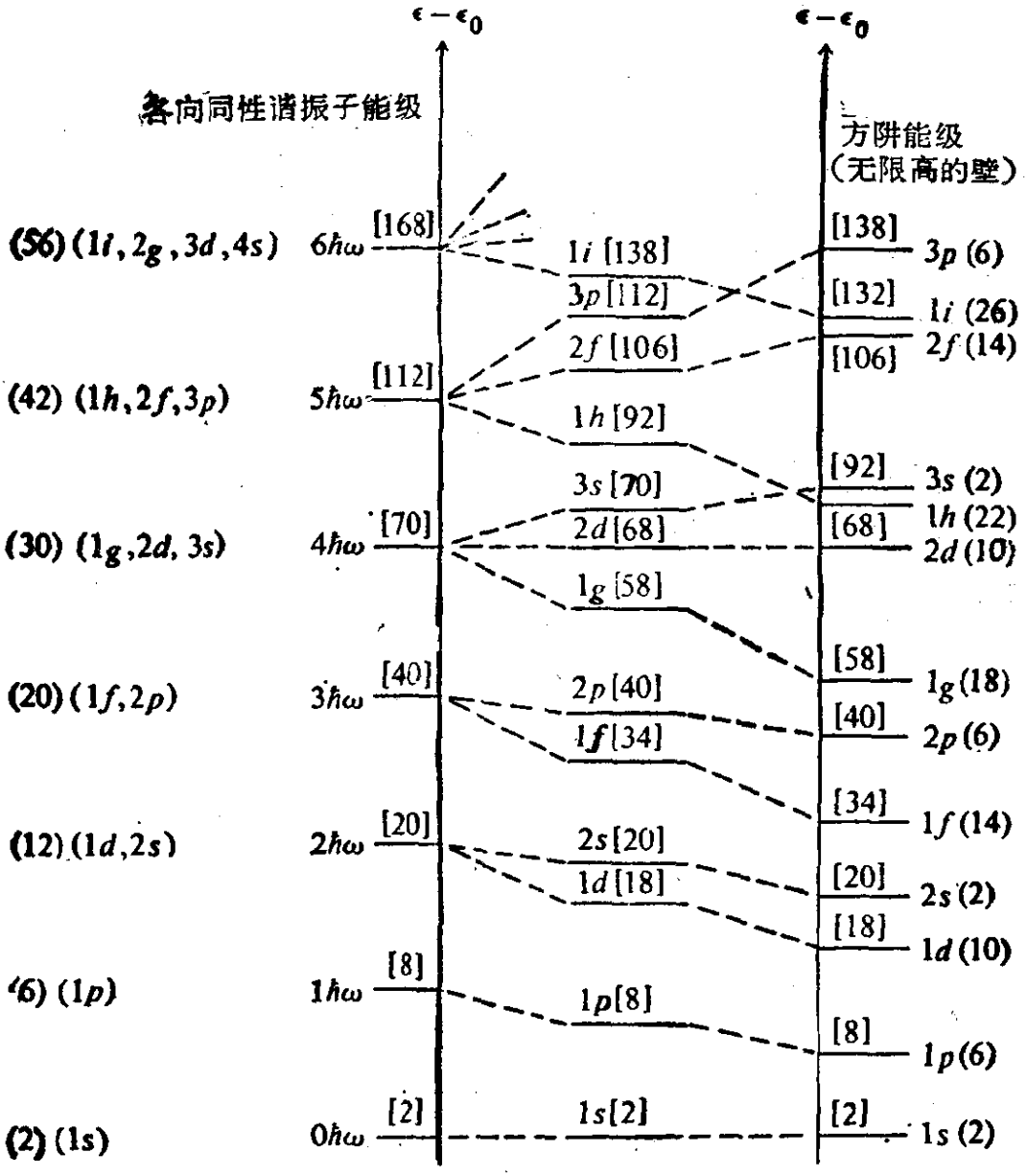


图 57.2 三维各向同性谐振子的能级系统(左边)和壁为无限高的方阱的能级系统(右边). 各态的简并度表示于圆括号中，到给定的态的累计能级数表示于方括号中. (引自 M. G. Maye: and J.H.D. Jensen, "Elementary Theory of Nuclear shell Structure" p.53, John Wiley and Sons Inc, New York.)

1) P. M. Morse and H. Fesh bach. "Methods of Theoritical Physics", pp.784, 1662, McGraw-Hill Book Company, New York, 1953

$$u_{nl}(q)=N_{nl}q^{l+1}e^{-\frac{1}{2}q^2}L_{n-1}^{l+\frac{1}{2}}(q^2), \tag{57.8}$$

$$L_p^a(z)\equiv\frac{\Gamma(a+p+1)}{\Gamma(p+1)}\frac{e^z}{z^a}\cdot\frac{d^p}{dz^p}(z^{a+p}e^{-z}), \tag{57.9}$$

其中[1]

$$q=\frac{r}{b},\quad \hbar\omega\equiv\frac{\hbar^2}{mb^2}. \tag{57.10}$$

像在方阱中那样，n 表示径向波函数的节点数，包括无限远的节点在内，它取如下的值

$$n=1,2,\cdots\infty. \tag{57.11}$$

这些函数可用标准公式[2]

$$N_{nl}^2=\frac{2(n-1)!}{b\left[\Gamma\left(n+l+\frac{1}{2}\right)\right]^3} \tag{57.12}$$

归一化．所得的三维谐振子的本征值谱是众所周知的，

$$\epsilon_{nl}=\hbar\omega\left(N+\frac{3}{2}\right)-V_0, \tag{57.13 a}$$

$$N=2(n-1)+l=0,1,2,\cdots\infty, \tag{57.13 b}$$

并表示于图 57.2 的左边．这些简并能级包含了 l 不同的态，能级间距为 $\hbar\omega$．我们把它们叫作振子壳层．对这两种模型势(图 57.1) 进行比较时，我们选择 V_0 的值使 $1s$ 能级的能量相同．

真实的原子核单粒子阱的深度是有限的．尽管如此，结合能大的低能级，在势阱的壁向无限延伸时，实质上保持不变．至少对于这些态，真实的 Hartree-Fock 势的形状很可能是在

---

1) 对均方核半径的拟合，给出粗略估计 $\hbar\omega\approx 41$ 兆电子伏$/A^{1/3}$

2) P.M. Morse and H. Feshbach, 前引书 p. 785

方阱和振子之间，我们很容易在这两种情况之间进行内插．当方阱底边棱角改钝或者振子底部拉平之时，n 和 l 仍然是好的量子数．l 最高的态靠近势的边缘的概率最大；并且，如图 57.2 所示，从谐振子变到方阱，它们的能量将降低．

自旋轨道分裂

从实验上知道，某些核子的群具有与原子物理中的闭壳层相应的特殊稳定性．这些“幻数”是 2，8，20，28，50，82，126，……．显然，图 57.2 只是正确地预言了主壳层这样闭合的前三个．Mayer 和 Jensen[1] 因而提出，原子核的 Hartree-Fock 单粒子势还有吸引的单粒子自旋-轨道项[2]

$$H' = -\alpha(r)\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}. \tag{57.14}$$

由于有这个相互作用，单粒子本征态可用 $\left|nl\frac{1}{2}jm_j\right\rangle$ 表征，算符 $\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}$ 具有如下本征值

$$\begin{aligned}\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}\left|nl\frac{1}{2}jm_j\right\rangle &= \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2-\mathbf{l}^2-\mathbf{s}^2)\left|nl\frac{1}{2}jm_j\right\rangle \\ &= \frac{1}{2}[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)] \\ &\quad\times\left|nl\frac{1}{2}jm_j\right\rangle. \end{aligned}\tag{57.15}$$

“伸张的”情况 $\left(j=l+\frac{1}{2}\right)$ 导致 $\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}=l/2$，而“折叠的”

---

1) 参阅：M. G. Mayer and J. H. D. Jensen, “Elementary Theory of Nuclear shell Structure”, John Wiley and Sons, Inc, New York, 1955.

2) 有一些理论上的证据表明，这一项起源于两个核子间的自旋轨道力．参阅，例如，K. A. Brueckner, A.M. Lockett, and M. Rotenberg, *Phys. Rev.* **121**. 255 (1961)，也可参阅 B. R. Barrett, *Phys. Rev.* **154**:955 (1967)

情况 $\left(j=l-\frac{1}{2}\right)$ 则导致 $\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}=-(l+1)/2$. 这样第一级分裂由下式给出

$$e_{l-\frac{1}{2}}-e_{l+\frac{1}{2}}=\alpha_{nl}\frac{1}{2}(2l+1), \tag{57.16}$$

$$\alpha_{nl}\equiv\int u_{nl}^2(r)\alpha(r)dr. \tag{57.17}$$

对于固定的 l 和 j，我们说 $(2j+1)$ 个简并的 m_j 态构成 j 壳层(见图 57.3).

对于吸引的自旋-轨道力 ($\alpha_{nl}>0$)，伸张的态，或者说对于给定的 l 其 j 较高的态，能量较低. 此外，如图 57.2 所表明，阱底被拉平时，在任一振子壳层中 l 最高的态被推移向下. 因而，如图57.3所表明，可能出现这样的情况：一个振子壳层中 j 和 l 最高的态也许实际上被下推到下一个较低的振子壳层中去，从而使观察到的幻数得到解释. 注意被推下的态具有宇称 $(-1)^l$ 与振子壳层中的其他态相反，并且有高的 j. 这个见解具有许多有意义的后果；特别是，它解释了同质异能孤岛，或者说具有这种低激发态的原子核的成群聚集，这些激发态通过 γ 跃迁衰变到基态，不过这过程很缓慢.

单粒子矩阵元

作为对原子核结构的初步描述，我们考虑一种极端的单粒子壳层模型，这种模型适用于核子数为奇数的原子核. 在这种图象中，图57.3中的能级依次填满，原子核的一切性质可认为都来自最后一个奇核子. 在预言这种原子核的角动量和宇称方面，这一模型特别成功. 它也使得可以用来计算原子核的其他性质，例如电磁矩.

质子和中子的磁偶极矩算符是

$$\mu_p = \mu_N(1 + 2\lambda_p \mathbf{s}), \tag{57.18 a}$$

$$\mu_n = \mu_N(2\lambda_n \mathbf{s}), \tag{57.18 b}$$

这里

$$\lambda_p = +2.793, \quad \lambda_n = -1.913, \quad \mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c}. \tag{57.19}$$

角动量为 j 的原子核的磁矩由下式定义[1]：

$$\mu = \langle j, m = j | \mu_{10} | j, m = j \rangle = \frac{\langle jj10 | j1jj \rangle}{(2j+1)^{1/2}} \langle j \| \mu \| j \rangle. \tag{57.20}$$

在极端的单粒子壳层模型中，这个量是从最后一个核子的矩阵元计算出来的，它们具有

$$\left\langle l\,\frac{1}{2}\,j \| \mathbf{1} \| l\,\frac{1}{2}\,j \right\rangle \text{ 和 } \left\langle l\,\frac{1}{2}\,j \| \mathbf{s} \| l\,\frac{1}{2}\,j \right\rangle$$

的形式. 这些正好是一种耦合方案中的张量算符的约化矩阵元（见附录 B），我们求得

$$\frac{\mu}{\mu_N} = \frac{1}{2(j+1)} \{[j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)] + 2\lambda[j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)]\}, \tag{57.21}$$

而 $s = \frac{1}{2}$. 对于中子，只有正比于 λ 的第二项有贡献. 可以立即认出方程（57.21）是从角动量加法的简单矢量模型得出的. $j = l \pm \frac{1}{2}$ 的两种情况成为

$$\frac{\mu}{\mu_N} = \begin{cases} j - \frac{1}{2} + \lambda & \left(j = l + \frac{1}{2}\right), \quad (57.22\text{ a}) \\ j + \frac{j}{j+1}\left(\frac{1}{2} - \lambda\right) & \left(j = l - \frac{1}{2}\right). \quad (57.22\text{ b}) \end{cases}$$

1) 在整个这一章中，我们一般略去与讨论并不直接相关的一切量子数.

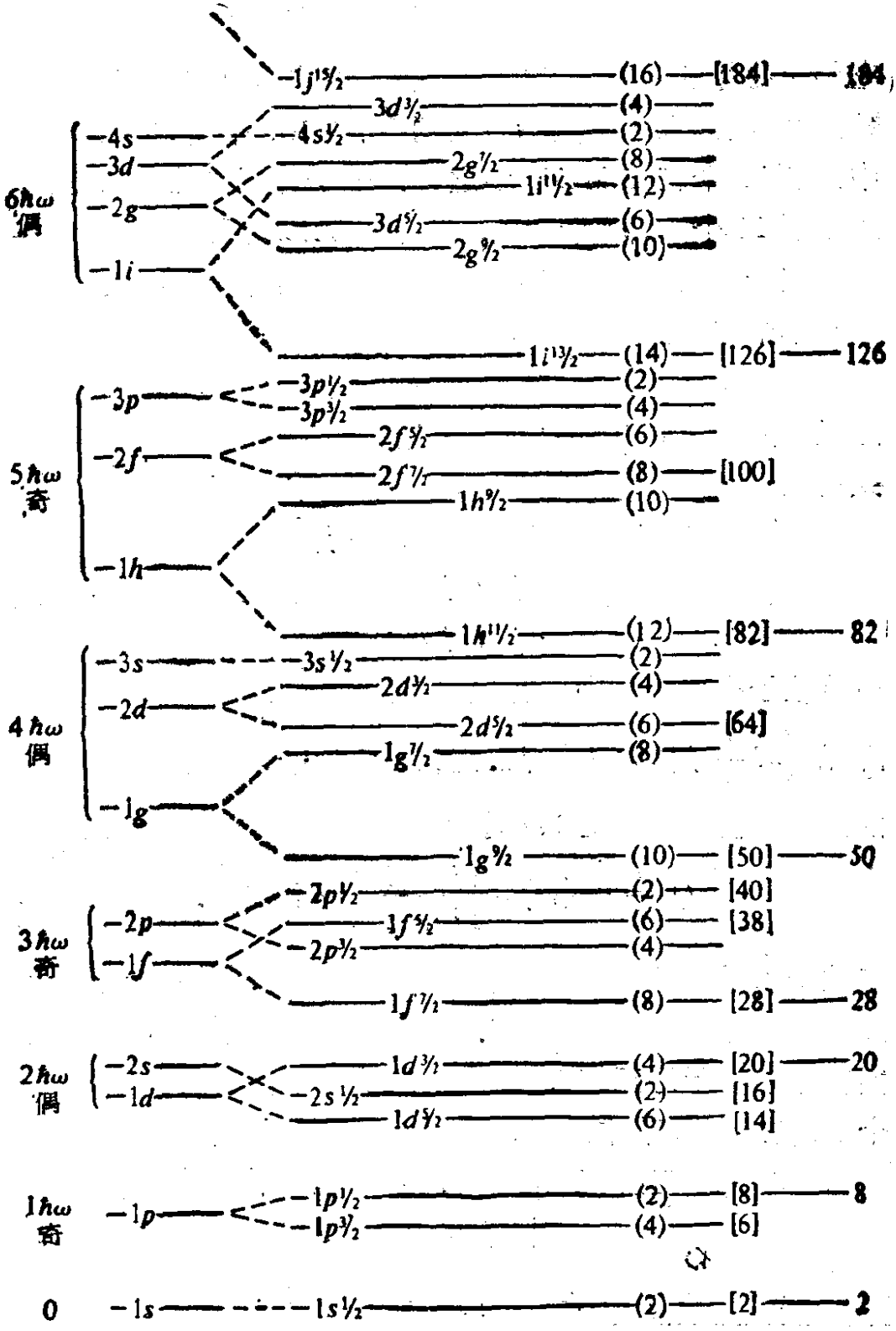


图 57.3 原子核能级系统的示意图解，右边是有自旋轨道耦合$H'=-\alpha\,\mathbf{l}\cdot\mathbf{s}$的，左边则是没有这种耦合的.(引自 M. G. Mager and J.H.D Jensen, "Elemehtary Theory of Nuclear Shell Structure". p. 58. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1955.)

它们是磁矩的单粒子 Schmidt 线[1]. 这些结果与任意径向波函数无关，而只取决于角动量的耦合.在 137 个奇 A 的原子核矩中，只有 5 个在 Schmidt 线之外. 一个有意义的事实是，这些矩除了 10 个以外，全都处于方程 (57.19) 所给出的全部矩的值与完全熄灭的 (纯 Dirac) 值 $\lambda_p = 1$，$\lambda_n = 0$ 之间[2].

单个质子的电四极矩算符是

$$Q_{20} = 3z^2 - r^2 = 2r^2 c_{20}, \tag{57.23}$$

这里 $c_{KQ} \equiv [4\pi/(2K+1)]^{\frac{1}{2}} Y_{KQ}$，而原子核的四极矩由下式定义

$$\begin{aligned} Q &\equiv \langle j, m = j | Q_{20} | j, m = j \rangle \\ &= \begin{pmatrix} j & 2 & j \\ -j & 0 & j \end{pmatrix} \langle j \| Q_2 \| j \rangle. \end{aligned} \tag{57.24}$$

在单粒子壳层模型中，有关的矩阵元又是最后那个粒子的矩阵元 $\left\langle nl\,\frac{1}{2}\,j \| Q_2 \| nl\,\frac{1}{2}\,j \right\rangle$. 在耦合方案中算出这个张量算符的矩阵元[见方程 (B.34 a)]为

$$Q = -\langle r^2 \rangle_{nl} \frac{2j-1}{2j+2} \quad \left(j \geqslant \frac{3}{2}\right). \tag{57.25}$$

奇数个质子的原子核，如其壳层不到半满，则其四极矩倾向于为负值，如这个模型所预言. 如果壳层超过半满，则四极矩的实验值倾向于为正值[3]. 这表明需要一个自洽的多体处理，这个处理在第 58 节中给出.

在单粒子壳层模型中，四极矩满足如下关系

$$|Q| < R^2, \tag{57.26}$$

这里 R 是原子核半径. 在大多数情况下，四极矩的实验值要

1) T. Schmidt, *Z. Physik*, **106**:358(1937)

2) M.A. Preston, "Physics of the Nucleus", pp. 70—75. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading,Mass., 1962.

3) M.A. Preston, 前引书, p. 68

大得多，特别是远离闭壳层的情况. 例如[1]，$Q(_{71}Lu^{175})/(1.2\,A^{\frac{1}{3}}F)^2 = +13$. 在单粒子壳层模型中，奇数个中子的原子核应该没有电四极矩. 实验上得出的这些原子核的性质，就好象这最后一个中子竟是一个质子时的情况，其四极矩甚至比这一模型就质子所预言的还要大得多. 例如[2]，$Q(Er_{99}^{167})/(1.2A^{\frac{1}{3}}F)^2 \approx +23$. 这些数值这么大的解释是核心并非惰性的，实际上可以由于价中子的存在而变形. 因为核心具有电荷 Z，很小的形变就会对 Q 有很大影响[3]. 遗憾的是，对于变形原子核的描述已超出本书的范围[4]，本章的余下部分将集中讨论球形原子核，即接近于闭壳层的那些原子核.

58. 壳层中的多粒子[5]

上节研究了原子核的极端的单粒子模型. 现在采取下一逻辑步骤，考虑用相互作用的价粒子填充 j 壳层的问题. 在整个讨论中假定已填满的壳层组成一个惰性的核心.

两个价粒子：一般的相互作用与 $\delta(x)$ 力

当只有一个额外的粒子在一能级上时，原子核所具有的角动量和宇称就是这个额外核子的角动量和宇称. 两个全同的核子放在同一个 j 壳层中，将会发生什么情况呢？如果局限于给定的 j 壳层的子空间，我们可以采用速写记号 $\{nljm\}\rightarrow$

---

1) M. G. Mayer and J. H. D. Jensen, 前引书, pp. 79—80.

2) 同上.

3) J. Rainwater, *Phys. Rev.*, **79**:432(1950).

4) 关于这一课题的透彻讨论见 A. Bohr and B. R. Mottelson, "Nuclear Structure," W.A. Benjamin, Inc., New York, Vol. I(1969)and Vols. II and III.

5) 关于多粒子壳层模型的极好的讨论见 A. de-Shalit and I. Talmi. "Nuclear Shell Theory". Academic Press New York, 1963. —书中.

m. 因而，对于两个全同粒子，具有确定的总 J 值的态可以写成

$$|j^2JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{m_1m_2}\langle jm_1\, jm_2|jjJM\rangle a^\dagger_{m_1}a^\dagger_{m_2}|0\rangle, \quad (58.1)$$

这里上标 2 表示这一壳层中的粒子数. 由于费米子算符是反对易的，Clebsch-Gorden 系数在交换 $m_1 \rightleftharpoons m_2$ 下的对称性 (B.19b) 以及傀指标的改换给出

$$|j^2JM\rangle = (-1)^{2j-J+1}|j^2JM\rangle.$$

我们得出结论：J 必须为偶数，否则这种态等于零；因而两个全同的价核子具有如下容许态

$$J^\pi = 0^+, 2^+, 4^+, \cdots, (2j-1)^+. \quad (58.2)$$

在单粒子壳层模型中，这些态是简并的，因为核心是球对称的，并且价粒子并不相互作用.

对于实际的原子核，这种简并性解除了，实验事实是，所有偶偶核都具有 $J^\pi = 0^+$ 的基态. 此外，假定在奇 A 核的基态中，偶数个核子耦合起来，形成 $J^\pi = 0^+$，就可以理解奇 A 核的性质. 这引起了问题：这些事实是否可以在多粒子壳层模型的框架中理解？由价核子所形成的态的简并性，只有引人这些核子之间的相互作用才能解除. 作为初步讨论，我们将利用一级微扰论，并计算一次量子化矩阵元 $\langle j^2JM|V|j^2JM\rangle$ 所引起的能级移动. 这些矩阵元对 J 和 M 是对角的，且与 M 无关，因为两粒子势在转动下是不变的. 然而，由于两个粒子的密度不相同，它们仍然与 J 有关.

为了研究 j 壳层上两个相互作用粒子的能级编序，我们先把一般的转动不变的相互作用 $V(r_1, r_2, \cos\theta_{12})$ 作多极展开

$$V(r_1, r_2, \cos\theta_{12}) = \sum_K f_K(r_1, r_2)P_K(\cos\theta_{12}). \quad (58.3)$$

这个关系只不过是用 $\cos\theta_{12}$ 的函数的完全集合来展开，利用

Legendre 多项式的正交性，可把它反过来写成

$$f_K = \frac{2K+1}{2}\int_{-1}^{1} P_K(x)V(r_1,r_2,x)dx. \qquad (58.4)$$

用球谐函数展开，

$$P_K(\cos\theta_{12}) = \frac{4\pi}{2K+1}\sum_M Y_{KM}(\Omega_1)Y^*_{KM}(\Omega_2)$$
$$\equiv c^1_K \cdot c^2_K, \qquad (58.5)$$

方程 (58.3) 可以改写为

$$V(r_1, r_2, x) = \sum_K f_K(r_1,r_2)c^1_K \cdot c^2_K. \qquad (58.6)$$

为了一般性，取两个任意的单粒子态 $\varphi_{n_1l_1j_1m_1}(1)$ 和 $\varphi_{n_2l_2j_2m_2}(2)$，它们耦合起来形成确定的 J 和 M，我们对这样的单粒子态计算 V 的期待值. 由附录 B 的关系式 (B.33)，得出这矩阵元为

$$\langle j_1j_2JM|V|j_1j_2JM\rangle$$
$$= \sum_K F_K(-1)^{j_1+j_2+J}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_2 & j_1 & K \end{Bmatrix}\langle j_1\|c_K\|j_1\rangle\langle j_2\|c_K\|j_2\rangle, \qquad (58.7)$$

这里径向矩阵元由下式定义

$$F_K \equiv \int u^2_{n_1l_1}(r_1)u^2_{n_2l_2}(r_2)f(r_1,r_2)dr_1dr_2. \qquad (58.8)$$

对总角动量 **J** 的依赖关系，全部包含在 6-j 符号之中，而一切具体的原子核性质，全都包含在多极强度 F_K 之中. 由于

$$\left\langle l\frac{1}{2}j\|c_K\|l\frac{1}{2}j\right\rangle$$

$$= \begin{cases} (-1)^{j+\frac{1}{2}}(2j+1)\begin{pmatrix} j & K & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}, & (K\text{ 偶}) \\ 0, & (K\text{ 奇}), \end{cases} \qquad (58.9)$$

方程(58.7)可以写成[1]

$$\langle j_1 j_2 JM|V|j_1 j_2 JM\rangle$$

$$= \sum_{\text{偶}K} F_K(-1)^{J+1}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_2 & j_1 & K \end{Bmatrix}(2j_1+1)(2j_2+1)$$

$$\times \begin{pmatrix} j_1 & K & j_1 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & K & j_2 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \qquad (58.10)$$

对于 j 壳层中 J 为偶数的两个全同粒子，这个表示式归结为

$$\langle j^2 JM|V|j^2 JM\rangle$$

$$= \sum_{\text{偶}K} F_K(-1)^{J+1}\begin{Bmatrix} j & j & J \\ j & j & K \end{Bmatrix}(2j+1)^2\begin{pmatrix} j & K & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^2. \qquad (58.11)$$

如果所有的 F_K 都是负的(这相当于两核子间的力为吸引力)。则对方程 (58.11) 的详尽研究表明：谱将象图 58.1 a 中的那样。这是因为一般说来，最大的 6-j 符号是 $J=0$ 的[2]。

上面导出的方程 (58.10) 也适用于在 j_1 和 j_2 壳层上具有一个额外的质子和中子的奇-奇核。在这种情况下，对于吸引相互作用，最低的态将具有 $J=|j_1-j_2|$，而第一激发态则证明是具有 $J=j_1+j_2$ 的 (图 58.1)。这些结果的原因是容易看出的。矩阵元$\langle j_1 j_2 JM|V|j_1 j_2 JM\rangle$ 实质上是两个单粒子波函数的重叠的量度。取得最佳重叠的总是两个粒子的角动量相反的态，次佳重叠的态则是两个粒子的角动量同向排列的。例如，如果写 $\mathbf{L}=\mathbf{l}_1+\mathbf{l}_2$，并取 $\mathbf{l}_1\cdot\mathbf{l}_2$ 作为重叠的量度(见图 58.2)，

---

1) M. Rotenberg, R. Bivens, N. Metropolis, and J. K. Wooten, Jr, "The 3-j and 6-j Symbols", p.6. The Technology Press, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Mass., 1959.

2) M. Rotenkerg et al., 前引书。

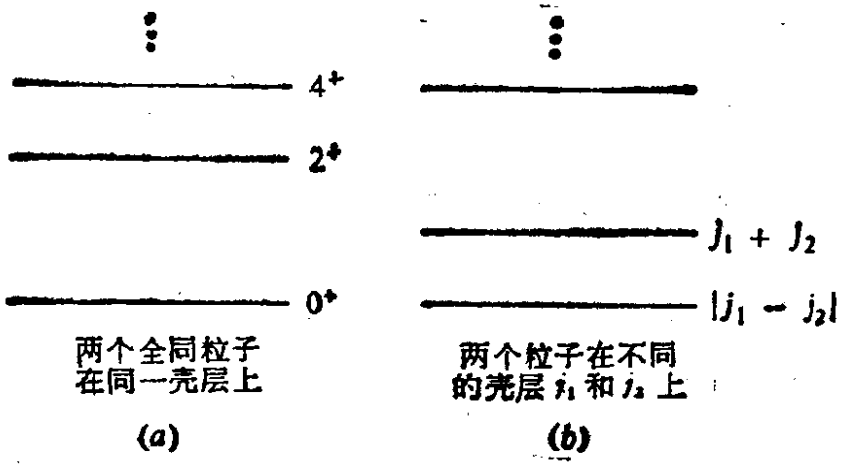


图 58.1　具有吸引相互作用的两粒子谱.

则

$$\mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{l}_2 = \frac{1}{2}[L(L+1) - l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)]$$

$$= \begin{cases} l_1 l_2 & (L = l_1 + l_2) \\ -(l_1+1)l_2 & (L = l_1 - l_2 \geqslant 0). \end{cases} \tag{58.12}$$

如果角动量方向相反,则这重迭较大. 由于 Pauli 原理,两个全同粒子不能同向排列.

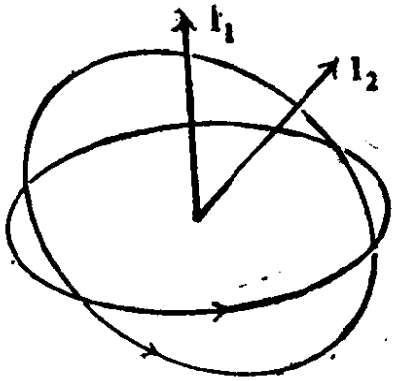


图 58.2　轨道重叠的定性图象.

用吸引的相互作用势这样一个简单模型，可以更清楚地看出这些结果. 假定

$$V(1,2) = -g\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$$

$$= -\frac{g}{\pi}\delta(1-\cos\theta_{12})\frac{\delta(r_1 - r_2)}{r_1 r_2}, \tag{58.13}$$

其中 $g>0$. 这给出

$$f_K(r_1,r_2)=-\frac{g}{4\pi}(2K+1)\frac{\delta(r_1-r_2)}{r_1r_2}, \tag{58.14}$$

$$F_K=-2Ig(2K+1), \tag{58.15}$$

这里

$$I\equiv\frac{1}{8\pi}\int u^2_{n_1l_1}(r)u^2_{n_2l_2}(r)\frac{dr}{r^2}. \tag{58.16}$$

现在可以计算方程 (58.11) 中的对K的求和而定出 j 壳层中两个全同粒子的能量移动[1]. 对于偶的 J, 我们求得

$$\sum_{\text{偶}K}(2K+1)\begin{Bmatrix} j & j & J\\ j & j & K\end{Bmatrix}\begin{pmatrix} j & K & j\\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}^2$$

$$=-\frac{1}{2}\begin{pmatrix} j & j & J\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0\end{pmatrix}^2. \tag{58.17}$$

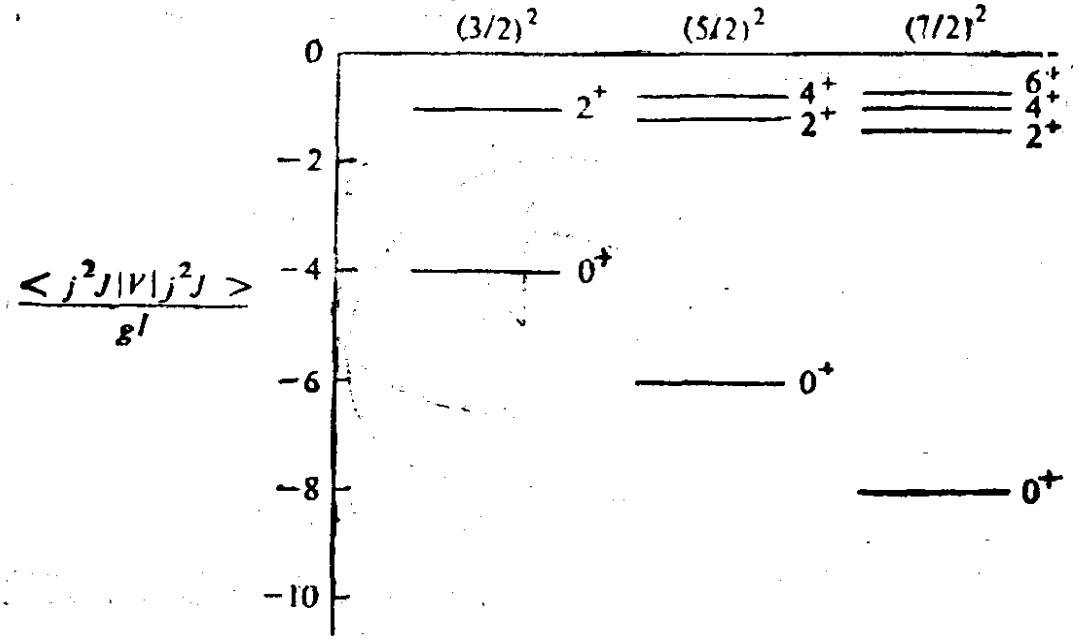


图 58.3　j 壳层中的两个全同粒子的谱[方程 (58.18)] 其相互作用 $V(x_1-x_2)=-g\delta(x_1-x_2)$

1) M. Rotenberg, 前引书,方程 (2.19). 注意加进一个因子$(1/2)[1+(-1)^K]$ 可以把对偶K求和转换为对所有K求和.

由此得出

$$\langle j^2JM|V|j^2JM\rangle = -Ig(2j+1)^2\begin{pmatrix} j & j & J \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0\end{pmatrix}_0^2 \quad (58.18)$$

对于一些简单情况，所得的谱示于图 58.3. 我们看到 0^+态的能量确实最低，并且从激发态分离开，而在这个 δ-函数势的情况下，这些激发态几乎是简并的，其间相差配对能

$$\langle j^200|V|j^200\rangle = -(2j+1)Ig. \quad (58.19)$$

注意，这个能量移动正比于 $2j+1$，因而，如果 $j'-j$ 足够大，把一对全同粒子从 j 壳层提到较高的 j' 壳层，有时在能量上有利的. 在这种最低级计算[只取 $V(1,2)$ 的期待值]中，这些能级的相对位置是价核子间两体相互作用的直接量度. 实际的核谱显示了图 58.3 所表明的许多特点.

几个粒子：正常耦合

对于短程的吸引相互作用，我们已经明白地证明，同一个 j 壳层上，一对全同粒子的能量最低的态为

$$|j^200\rangle = \xi_0^\dagger|0\rangle, \quad (58.20)$$

这里，我们定义了一个新的两粒子算符

$$\xi_{JM}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{m_1m_2}\langle jm_1jm_2|jjJM\rangle a_{m_1}^\dagger a_{m_2}^\dagger, \quad (58.21)$$

而 $\xi_0^\dagger \equiv \xi_{J=0,M=0}^\dagger$. 这一论点提示我们，加进符合 Pauli 原理的最大数量的 $J=0$ 核子对，可得到 j 壳层中 N 个全同粒子的能量最低的态. 这些(未归一化的)态是

$$\text{正常耦合壳层模型基态}\begin{cases} \text{三粒子态} = a_{jm}^\dagger\xi_0^\dagger|0\rangle, \\ \text{四粒子态} = \xi_0^\dagger\xi_0^\dagger|0\rangle, \\ \text{五粒子态} = a_{jm}^\dagger\xi_0^\dagger\xi_0^\dagger|0\rangle, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \end{cases} \quad (58.22)$$

壳层模型的一条基本假定是，这些正常耦合态构成多重占据

的 j- 壳层原子核的基态[1]. 这个模型正确地预言了大多数原子核的基态角动量和宇称. 我们即将尝试从理论上证明这个假定的合理性，不过，还是让我们先简短考察一下它的一些后果.

最为有用的结果大概是，现在可以显示地算出任意的多极算符 $\hat{T}_{KQ}$ 的基态期待值. 对于一组奇数个核子，正常耦合方案给出[2]

$$\langle j^N j \| \hat{T}_K \| j^N j \rangle = \begin{cases} \langle j \| T_K \| j \rangle & (K\text{奇}) \quad (58.23\,\text{a}) \\ \dfrac{2j+1-2N}{2j-1} \langle j \| T_K \| j \rangle \begin{pmatrix} K\text{偶} \\ K \neq 0 \end{pmatrix} & (58.23\,\text{b}) \end{cases}$$

这里 N 是（奇的）粒子数（如 N 为偶数，则这一模型给出 $J = 0$）. 这些关系式把正常耦合方案中的多粒子矩阵元直接用单粒子矩阵元表示出来，这些矩阵元一般仍然依赖于量子数 n 和 l. 对于奇矩，例如磁偶极矩，求得的正好是单粒子值. 对于偶矩，例如电四极矩，存在一个缩小因子 $(2j+1-2N)/(2j-1)$. 在半填满的壳层上，$N = \frac{1}{2}(2j+1)$，这个缩小因子为零；从一个壳层有 N 个粒子变为一个壳层有 N 个空穴时，即在 $N \to 2j+1-N$ 时，这个因子改变符号. 这种符号的改变是符合实验观察结果的［参阅方程（57.25）后面的讨论］.

方程(58.23) 的推导是一个例证，它说明二次量子化方法是很有用的，所以我们现在要证明这些重要结果. 在多重占据的 j 壳层的子空间中，任意张量算符的 $Q = 0$ 分量可以写成

$$\hat{T}_{K0} = \sum_m a_m^\dagger \langle m | T_{K0} | m \rangle a_m$$

1) M.G. Mayer and J.H.D. Jensen, 前引书, p. 241

2) A de-Shalit and I Talmi, 前引书, p. 531

$$= \sum_m (-1)^{j-m}\langle jmj-m|jjK0\rangle \times \frac{\langle j\|T_K\|j\rangle}{(2K+1)^{1/2}}\hat{n}_m. \tag{58.24}$$

这里利用了 Wigner-Eckart 定理，从而简化了单粒子矩阵元，$\hat{T}_{K0}$ 的多体矩阵元也可以用这一定理改写为

$$\frac{\langle j^N j\|\hat{T}_K\|j^N j\rangle}{(2K+1)^{1/2}} = \sum_m (-1)^{j-m}\langle jmj-m|jjK0\rangle \times \langle j^N jm|\hat{T}_K|j^N jm\rangle. \tag{58.25}$$

这样，方程 (58.22)，(58.24) 和 (58.25) 的结合给出

$$\frac{\langle j^N j\|\hat{T}_K\|j^N j\rangle}{\langle j\|T_K\|j\rangle} = \sum_{mp}(-1)^{j-m}(-1)^{j-p}\langle jmj-m|jjK0\rangle \times \langle jpj-p|jjK0\rangle \times \frac{\langle 0|\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0 a_m\hat{n}_p a_m^\dagger\hat{\xi}_0^\dagger+{}^\dagger 0\cdots\hat{\xi}_0^\dagger|0\rangle}{\langle 0|\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0 a_q a_q^\dagger\hat{\xi}_0^\dagger\cdots\hat{\xi}_0^\dagger|0\rangle}, \tag{58.26}$$

这里因子 $\hat{\xi}_0^\dagger$ 和 $\hat{\xi}_0$ 出现 $(N-1)/2$ 次，而由于转动不变性，分母中的归一化因子与 q 无关. 用下面两个恒等式

$$[\hat{n}_p, a_m^\dagger] = \delta_{pm}a_p^\dagger, \tag{58.27}$$

$$\sum_p (-1)^{j-p}\langle jpj-p|jjK0\rangle[\hat{n}_p, \hat{\xi}_0^\dagger] = \frac{2}{(2j+1)^{1/2}}\hat{\xi}_{K0}^\dagger, \tag{58.28}$$

以及对所有 J 和 M 都成立的

$$[\hat{\xi}_{K0}^\dagger, \hat{\xi}_{JM}^\dagger] = 0,$$

我们得到

$$\frac{\langle j^N j\|\hat{T}_K\|j^N j\rangle}{\langle j\|T_K\|j\rangle} = 1 + \sum_m (-1)^{j-m}\langle jmj-m|jjK0\rangle \times \frac{\langle 0|\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0 a_m a_m^\dagger\hat{\xi}_0^\dagger\cdots\hat{\xi}_0^\dagger\hat{\xi}_{K0}^\dagger|0\rangle}{\langle 0|\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0 a_q a_q^\dagger\hat{\xi}_0^\dagger\cdots\hat{\xi}_0^\dagger|0\rangle}$$

$$\times \left[\frac{N-1}{2}\ \frac{2}{(2j+1)^{1/2}}\right]. \tag{58.29}$$

因为，K 为奇数时，$\hat{\xi}^{\dagger}_{K0} \equiv 0$ [参阅方程(58.1)后面的论述]，方程 (58.23 a) 得以证明. K 为偶数时，我们有恒等式，

$$a_m a_m^{\dagger} = 1 - a_m^{\dagger} a_m = 1 - \hat{n}_m.$$

如果 $K \neq 0$，1 这一项在分子中没有贡献，$-\hat{n}_m$ 项完全像以前一样则可以移到左边. 分母与 q 无关，因而，可取平均值如下:

$$\frac{1}{2j+1}\sum_q a_q a_q^{\dagger} = 1 - \frac{\hat{N}}{2j+1} \to \frac{2j+1-(N-1)}{2j+1}.$$

按这方式，我们得到

$$\frac{\langle j^N j \| \hat{T}_K \| j^N j\rangle}{\langle j \| T_K \| j\rangle} = 1 - \frac{\langle 0|\hat{\xi}_{K0}\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_{K0}^{\dagger}|0\rangle}{\langle 0|\hat{\xi}_0\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_0^{\dagger}|0\rangle} \times \left(\frac{N-1}{(2j+1)^{\frac{1}{2}}}\right)^2 \frac{2j+1}{2j+2-N}. \tag{58.30}$$

用关系式

$$[\hat{\xi}_0, \hat{\xi}_0^{\dagger}] = \frac{2j+1-2\hat{N}}{2j+1}, \tag{58.31}$$

$$[\hat{\xi}_0, \hat{\xi}_{K0}^{\dagger}]|0\rangle = 0 \quad (K \neq 0), \tag{58.32}$$

现在可以直截了当地证明[见习题 15.4]

$$\frac{\langle 0|\hat{\xi}_{K0}\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_{K0}^{\dagger}|0\rangle}{\langle 0|\hat{\xi}_0\hat{\xi}_0\cdots\hat{\xi}_0\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_0^{\dagger}|0\rangle} = \frac{2}{N-1}\ \frac{2j+1-(N-1)}{2j+1-2}. \tag{58.33}$$

这立即给出方程 (58.23 b).

正常耦合模型可以扩充到激发态[1]，例如，可以认为，能量低的那些态，是通过拆散一个 $J=0$ 的核子对，从而把方程

1) A de-Shalit and I. Talmi, 前引书, Secs, 27 and 30.

(58.22) 中的 $\hat{\xi}_0^\dagger$ 用 $\hat{\xi}_{JM}^\dagger$ 代替而得到的. 这个假定使我们得以求出多粒子系统的能谱. 我们注意到,在 j 壳层子空间中,描述一般的两粒子势的算符可以写作

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{m,npq} a_m^\dagger a_m \langle mn|V|pq\rangle a_q a_p, \tag{55.34}$$

这里的两粒子矩阵元已在前面讨论过，并且只显示出它对 m 依赖关系. 两粒子波函数,总可以按下面的关系式,用具有给定的总 J 和 M 的基展开，

$$\begin{aligned}\varphi_p(1)\varphi_q(2) &\equiv \varphi_{jp}(1)\varphi_{jq}(2)\\ &= \sum_{JM}\langle jpjq|jjJM\rangle\Phi_{j^2JM}(1,2).\end{aligned} \tag{58.35}$$

此外,势 V 是标量,因而其一般矩阵元成为

$$\langle j^2J'M'|V|j^2JM\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\langle j^2J|V|j^2J\rangle, \tag{58.36}$$

其余因子与 M 无关. 这样我们得到下面的一般表示式，它在 j 壳层内是正确的，

$$\hat{V} = \sum_{JM}\hat{\xi}_{JM}^\dagger\langle j^2J|V|j^2J\rangle\hat{\xi}_{JM}, \tag{58.37}$$

这里的算符 $\hat{\xi}_{JM}^\dagger$ 是方程 (58.21) 中定义的. 注意如果 J 不为偶数，$\hat{\xi}_{JM}$ 为零. 现在可以加上再减去下面这个表示式

$$\begin{aligned}&\sum_{JM}\hat{\xi}_{JM}^\dagger\langle j^20|V|j^20\rangle\hat{\xi}_{JM}\\ &\quad= \langle j^20|V|j^20\rangle\frac{1}{2}\sum_{mp}a_m^\dagger a_p^\dagger a_p a_m\\ &\quad= \langle j^20|V|j^20\rangle\frac{1}{2}\hat{N}(\hat{N}-1),\end{aligned} \tag{58.38}$$

j 壳层中的相互作用势成为

$$\begin{aligned}\hat{V} = &\sum_{JM}\hat{\xi}_{JM}^\dagger[\langle j^2J|V|j^2J\rangle - \langle j^20|V|j^20\rangle]\hat{\xi}_{JM}\\ &+\langle j^20|V|j^20\rangle\frac{1}{2}\hat{N}(\hat{N}-1).\end{aligned} \tag{58.39}$$

当我们计算多粒子相互作用能量这个算符的期待值时，最后一项将给出一个只与壳层中粒子数有关的常数．这样可以把多粒子能级间的能量差与两粒子能级间的能量差直接联系起来．二次量子化技术提供了求得这些关系的既优美而又直截了当的途径[1]，它构成大量优美工作的基础，这些优美的工作把相应于 j^N 组态的相邻原子核的能级关联起来，并对它们作出预言[2]．

配对力问题

我们现在来说明多粒子壳层模型的合理性．我们只考虑给定的 j 壳层的子空间，并假定在这个壳层的粒子之间存在着短程的吸引相互作用．在这种情况下，由图 58.3 显然可见，势中主要的两粒子矩阵元出现于核子对耦合成 $J=0$ 时．这个事实提示，在一个好的近似中，方程 (58.37) 中的势可以写成

$$\hat{V} \approx \hat{\xi}_0^{\dagger}\langle j^2 0 \mid V \mid j^2 0\rangle \hat{\xi}_0 = -G\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_0. \qquad (58.40)$$

这样的相互作用叫做纯配对力．它具有很大的优点：得出的问题可以严格解出[3]．

我们想求哈密顿函数

$$\hat{H} = \epsilon_0 \hat{N} + \hat{V} \qquad (58.41)$$

的谱，这里 ϵ_0 是特定壳层的单粒子 Hartree-Fock 能量，$\hat{V}$ 则由方程 (58.40) 给出．借助于辅助算符

---

1) 这些关系式中的系数叫做部分家系 (pareutage) 系数 (见习题 15.8)．

2) 一般的述见 I. Talmi and I. Unna, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **10**:353 (1960)．

3) G. Racah, *Phys. Rev.*, **63**:367(1943)．这里的解得自 A. K. Kerman, *Ann. Phys.* (*N.Y.*), **12**:300 (1961)．同样的赝自旋技巧，在较早的时候曾用在关于超导电性的讨论中，P.W. Anderson, *Phys. Rev.*, **112**:1900 (1958)．

$$\hat{S}_+ \equiv \left[\frac{1}{2}(2j+1)\right]^{\frac{1}{2}} \hat{\xi}_0^\dagger, \tag{58.42 a}$$

$$\hat{S}_- \equiv \left[\frac{1}{2}(2j+1)\right]^{\frac{1}{2}} \hat{\xi}_0, \tag{58.42 b}$$

$$\hat{S}_3 \equiv \frac{1}{4}[2\hat{N} - (2j+1)], \tag{58.42 c}$$

计算很容易进行. 方程(58.31)和关系式

$$[\hat{N}, \hat{\xi}_0^\dagger] = 2\hat{\xi}_0^\dagger \tag{58.43}$$

表明 $\hat{S}_\pm$ 和 $\hat{S}_3$ 遵从熟悉的对易关系

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_3, \tag{58.44 a}$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_3] = -\hat{S}_+, \tag{58.44 b}$$

$$[\hat{S}_-, \hat{S}_3] = \hat{S}_-, \tag{58.44 c}$$

这些正是角动量算符的对易关系. 量 $\hat{\mathbf{S}}^2$ 可以写成

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_3^2 + \frac{1}{2}[\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+]$$

$$= \hat{S}_3(\hat{S}_3 - 1) + \hat{S}_+\hat{S}_-. \tag{58.45}$$

上式经整理可得

$$\hat{S}_+\hat{S}_- = \hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{S}_3(\hat{S}_3 - 1). \tag{58.46}$$

用赝自旋算符来表示,相互作用哈密顿函数成为

$$\hat{V} = -\frac{2G}{2j+1}\hat{S}_+\hat{S}_-$$

$$= -\frac{2G}{2j+1}[\hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{S}_3(\hat{S}_3 - 1)], \tag{58.47}$$

因而,$\hat{H}$ 完全用 $\hat{\mathbf{S}}^2$ 和 $\hat{S}^3$ 表示了出来. 由于角动量算符 $\hat{\mathbf{J}}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的谱单纯由对易关系决定,我们可以立即推导算符 $\hat{\mathbf{S}}^2$ 和 $\hat{S}_3$ 的本征值谱,从而解决问题.

$\hat{\mathbf{S}}^2$ 的本征值具有 $S(S+1)$ 的形式,这里 S 是整数或半整数. 由角动量理论又可知道 $S \geqslant |S_3|$,而如果粒子数 $N \leqslant$

$2j+1$ 是给定的，则 S_3 可由方程 (58.42 c) 定出. 显然，S_3 的绝对值的最大值为 $|S_3|_{max}=(2j+1)/4$，而角动量的一般理论又要求 $S\leqslant|S_3|_{max}$. 这样，对于给定的 N，本征值 S 位于下列范围中：

$$\frac{1}{4}(2j+1)\geqslant S\geqslant\frac{1}{4}|2N-(2j+1)|, \quad (58.48)$$

而且必须是整数或半整数，视 $S_3=[2N-(2j+1)]/4$ 是整数还是半整数而定. 不管在哪一种情况下，S 的容许值之间总是相差整数，这提示下列定义，

$$S\equiv\frac{1}{4}(2j+1-2\sigma), \quad (58.49)$$

这里 σ 为一整数，叫做高位数 (seniority)[1]. 由方程(58.48)和(58.49) 可知，对于一定的 N，高位数 σ 的容许值为

$$\sigma=\left\{\begin{array}{l}0,2,4,\cdots,N \quad (N\text{偶})\\ 1,3,5,\cdots,N \quad (N\text{奇})\end{array}\right\}2N<(2j+1)\text{粒子}, \quad (58.50\,a)$$

$$\sigma=\left\{\begin{array}{l}0,2,4,\cdots,2j+1-N \quad (N\text{偶})\\ 1,3,5,\cdots,2j+1-N \quad (N\text{奇})\end{array}\right\}2N>(2j+1)\text{空穴}. \quad (58.50\,b)$$

第一种情况，对应于填充不到一半的壳层，或者说，对应于壳层中有一些粒子，至于第二种情形指的是填充过半的壳层，或者说对应于壳层中有若干空穴. 把方程 (58.41)，(58.42 c)，(58.47) 和 (58.49) 结合起来，得出 $\hat{H}$ 的准确谱

$$E_\sigma=N\epsilon_0-G\frac{N-\sigma}{2}\frac{2j+1+2-N-\sigma}{2j+1}$$

$$=N\left[\epsilon_0-\frac{G}{2}\left(1-\frac{N-2}{2j+1}\right)\right]$$

1) G. Racah, 前引书.

$$+\frac{G\sigma}{2}\left(1-\frac{\sigma-2}{2j+1}\right), \tag{58.51}$$

σ 的容许值由方程(58.50)给出[1].

我们现在要构造出 $\hat{H}$ 的几个最低的本征态，首先考虑粒子数 N 为偶数的情况. 显然，最低能态的 $\sigma=0$. 我们将证明，这个态是正常耦合壳层模型的基态，

$$|N,J=0;\sigma=0\rangle=\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_0^{\dagger}|0\rangle, \tag{58.52}$$

这里有 $N/2$ 个因子 $\hat{\xi}_0^{\dagger}$. 为了证明方程(58.52)是 $\hat{H}$ 的正确本征态，利用方程(58.31)的对易关系，并且在每一步中都用适当的本征值代替 $\hat{N}$，就得到

$$\begin{aligned}
&\hat{V}\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_0^{\dagger}|0\rangle\\
&=-G\left[\frac{2j+1-2(N-2)}{2j+1}+\frac{2j+1-2(N-4)}{2j+1}+\cdots\right.\\
&\quad\left.+\frac{2j+1}{2j+1}\right]\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}|0\rangle\\
&=-G\frac{N}{2}\left(\frac{2j+1-N+2}{2j+1}\right)\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}|0\rangle.
\end{aligned}$$

这就是所要的结果. 从方程(58.51)显然可见，第一激发态具有 $\sigma=2$. 这些态可以通过拆开一个 $J=0$ 的核子对得到.

$$|N,J,M;\sigma=2\rangle=\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_{JM}^{\dagger}|0\rangle$$
$$(J=2,4,6,\cdots,2j-1). \tag{58.53}$$

除最后一步外，证明完全象前面那样进行，而在最后一步中，对于 $J\neq 0$，$[\hat{\xi}_0,\hat{\xi}_{JM}^{\dagger}]|0\rangle=0$，因而 $\hat{V}$ 的本征值是

$$\begin{aligned}
&-G\left[\frac{N}{2}\left(\frac{2j+1-N+2}{2j+1}\right)-1\right]\\
&=-G\frac{N-2}{2}\cdot\frac{2j+1-N}{2j+1},
\end{aligned}$$

---

1) 我们不讨论本征态的简并性. 把在 j 壳层上总 J 的反对称态一一列举出来是一个直截了当的问题，其答案可参看例如 M.G. Mayer and J.H.D. Jensen, 前引书 64.

如所要求．高位数 σ 显然是这些态上的未配对粒子数．

对于奇数个价核子，最低能态可以写成

$$|N, J=j, m;\sigma=1\rangle=\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_0^{\dagger}a_{jm}^{\dagger}|0\rangle, \quad (58.54)$$

它是利用 $[\hat{\xi}_0, a_{jm}^{\dagger}]|0\rangle=0$ 完全象上面那样证明的．$\sigma=3$ 并且 $J\neq j$ 的第一激发态可以写成(见习题 15.7)

$$|N, J\neq j, M;\sigma=3\rangle$$
$$=\sum_{mn}\langle knjm|kjJM\rangle\hat{\xi}_0^{\dagger}\cdots\hat{\xi}_{kn}^{\dagger}a_{jm}^{\dagger}|0\rangle, \quad (58.55)$$

直到 7/2 的壳层，只有一个态的 $J=j$；而 $J\neq j$ 的那些态各是唯一的，因而与方程 (58.55) 中的 k 无关[1]．

现在我们可以利用配对相互作用 $\hat{V}=-G\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_0$ 来讨论 j^N 组态中的能谱．N 为偶数时，多粒子基态具有 $J^{\pi}=0^+$，而第一激发态总是在基态以上距离 G 处．这样，人们可以把 G 看作是能隙，或者配对能．在这个模型中，所有的第一激发态都是简并的，包含偶角动量，对应于有一个核子对被拆开的各种可能的状态．N 为奇数时，$\sigma=1$ 的正常耦合态总是基态，简并的第一激发态与基态隔开一个距离 $G(2j-1)/(2j+1)$．这样，我们得出一个重要结果：*壳层模型的耦合定则对于形式为* $\hat{V}=-G\hat{\xi}_0^{\dagger}\hat{\xi}_0$ *的势是成立的*．任一短程吸引势也可以写成这种形式，在这种意义上讲，我们就有了关于多粒子壳层模型的合理性的较为一般的理论上的说明．

这一模型在预言原子核的基态及其与第一激发态之间的能隙方面是十分好的；但是，所预言的激发态简并度却不大符合实际情况．

玻色子近似

严格的对易式的形式为

---

1) M. G. Mayer and J. H. D. Jensen, 前引书, p. 64.

$$[\hat{\xi}_0, \hat{\xi}_0^\dagger] = 1 - \frac{2\hat{N}}{2j+1}, \tag{58.56}$$

在给定的 j 壳层只具有少数几个粒子，从而在 $N \ll 2j+1$ 的情况下，此式提示一种很简单的近似. 因此，我们将假定如下的近似对易关系

$$[\hat{\xi}_{JM}, \hat{\xi}^\dagger_{J'M'}] \doteq \delta_{JJ'}\delta_{MM'}, \tag{58.57}$$

它在 $N \ll 2j+1$ 这个极限下是成立的. 于是可以得到N固定时的一般势为

$$V = \sum_{\lambda\mu} \hat{\xi}^\dagger_{\lambda\mu}\langle\lambda|V|\lambda\rangle\hat{\xi}_{\lambda\mu} \tag{58.58}$$

的严格能谱，因为方程 (58.57) 正是玻色子的对易关系，而 $\hat{V}$ 仅依赖于玻色子数算符.

$$\hat{V} = \sum_{\lambda\mu} \langle\lambda|V|\lambda\rangle\hat{N}_{\lambda\mu}, \tag{58.59}$$

$$\hat{N}_{\lambda\mu} \equiv \hat{\xi}^\dagger_{\lambda\mu}\hat{\xi}_{\lambda\mu}. \tag{58.60}$$

把 $N/2$ 个玻色子产生算符 $\hat{\xi}^\dagger_{\lambda\mu}$ 作用于真空，就得到偶N情况下的 $\hat{V}$ 的相应本征态. 特别是，如果

$$\hat{V} = -G\hat{\xi}^\dagger_0\hat{\xi}_0 = -G\hat{N}_0, \tag{58.61}$$

则能量仅与 $\hat{N}_0$ 的本征值(即耦合成 $J=0$ 的核子对的数目)

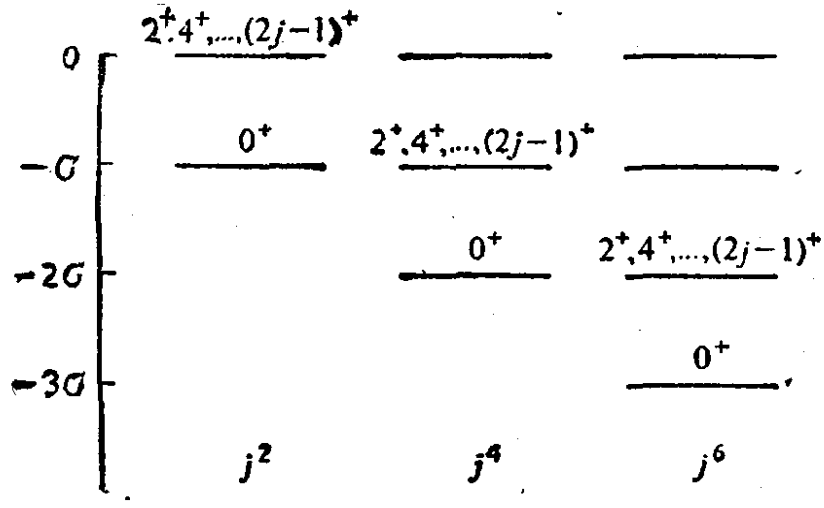


图 58.4 组态 j^N 在玻色子近似中的配对力的谱.

有关，其谱示于图 58.4. 如果我们令 $N-2\mathscr{N}_0=\sigma$，则在 $2\mathscr{N}_0\leqslant N\ll 2j+1$ 的极限下，方程(58.61)重现方程(58.51)的严格谱. 这结果说明，在该极限下采用方程(58.57)的近似对易关系是正当的.

Bogoliubov 变换[1]

我们已经看到，配对在核谱学中起着非常重要的作用. 因而把配对效应包括在修订的 $\hat{H}_0$ 之中是有意义的，这修订的 $\hat{H}_0$ 将为讨论核能谱提供一个较好的出发点. 这一目标可以通过 Bogoliubov 正则变换达到. 由于所得的 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{H}-\hat{H}_0$（如果不加在一起）并不使粒子数守恒，所以只有当所考虑的粒子数很大而相应的涨落 $(\langle\hat{N}^2\rangle-\langle\hat{N}\rangle^2)/\langle\hat{N}\rangle^2$ 很小可以忽略时，$\hat{H}_0$ 才是一个有意义的近似哈密顿函数[2]. 在重原子核中，这些条件得以最好地满足，这里我们只考虑球状系统.

我们将把前述关于单一 j 壳层的谱的讨论加以推广，这是用量子数 $|ljm\rangle$ 完全确定的态的集合来进行的. 此时，径向量子数 n 完全决定于原来的壳层选择. 这个集合可以与两个相邻的谐振子壳层一样大（见图 57.2 的左边）. 注意给定的态的宇称为 $(-1)^l$. 我们再次利用记号

$$|\alpha\rangle=|ljm_j\rangle\equiv|a,m_a\rangle, \tag{58.62 a}$$

$$|-\alpha\rangle=|a,-m_a\rangle, \tag{58.62 b}$$

这里量子数 $\{a\}$ 表示 $\{nlj\}$，正如已讨论过的，其中 n 是多余

1) S. T. Beliaev, Application of Canonical Transformation Method to Nuclei, in C. DeWitti (ed.) "The Many-body Problem", p. 377. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1959. 关于核谱学的这一方法的详细讨论，参阅 M. Baranger, *Phys. Rev.*, **120**:957 (1960) 和 A. M. Lane, "Nuclear Theory", W. A. Benjamin Inc., New York, 1964.

2) 对本节所讨论的方法可作一种改进，即从 $\hat{H}_0$ 的本征态中把对应于确定粒子数的那一部份投影出来. 参阅，例如 A.K. Kerman, R. D. Lawson, and M.H. Macfarlanle, *Phys, Rev.*, **124**: 162(1961)

的．在本节余下部分中．我们假定各壳层只为一种核子所填充，例如，一个具有闭合质子壳层和部分充填的中子壳层的原子核．

动能是标量算符，因而对于 α 是对角的，$\langle\alpha|T|\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}T_\alpha$．因而零温度下的热力学势可以写成

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_\alpha (T_\alpha - \mu)c_\alpha^\dagger c_\alpha$$

$$- \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma, \qquad (58.63)$$

这里，完全和方程（37.6）中一样，假定相互作用是吸引的（$V > 0$）．现在，对这个热力学势进行如下的正则变换

$$\begin{cases} A_\alpha^\dagger \equiv u_\alpha c_\alpha^\dagger - v_\alpha S_\alpha c_{-\alpha}, \\ A_\alpha \equiv u_\alpha c_\alpha - v_\alpha S_\alpha c_{-\alpha}^\dagger, \end{cases} \qquad (58.64)$$

这里为了使 $A^\dagger$ 为不可约张量算符，再次引入了周相 $S_\alpha = (-1)^{j_\alpha - m_\alpha}$．系数 u_α 和 v_α 取为实数，并且是归一化的，

$$u_\alpha^2 + v_\alpha^2 = 1,$$

因而变换确实是正则的，

$$\{A_\alpha, A_{\alpha'}^\dagger\} = \delta_{\alpha\alpha'}. \qquad (58.65)$$

方程 (58.64) 可以反转过来给出

$$\begin{cases} c_\alpha = u_\alpha A_\alpha + v_\alpha S_\alpha A_{-\alpha}^\dagger, \\ c_\alpha^\dagger = u_\alpha A_\alpha^\dagger + v_\alpha S_\alpha A_{-\alpha}. \end{cases} \qquad (58.66)$$

下一步工作是把 $\hat{K}$ 写成关于算符 A 和 $A^\dagger$ 的正规编序形式．正像第 37 节那样，这一计算很容易借助于 Wick 定理来完成，仅有的几个非零收缩是

$$\overbrace{c_\alpha^\dagger c_\beta}^{\cdot} = \delta_{\alpha\beta}v_b^2,$$

$$\overbrace{c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger}^{\cdot} = \delta_{\alpha,-\beta}v_a u_a S_\alpha,$$

$$\overbrace{c_\alpha c_\beta}^{\cdot} = \delta_{\alpha,-\beta}v_a u_a S_\beta.$$

对称性质

$$\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle = \langle\beta\alpha|V|\delta\gamma\rangle$$

使我们可以改写方程 (58.63) 中的算符，

$$c_\alpha^\dagger c_\beta = N(c_\alpha^\dagger c_\beta) + \delta_{\alpha\beta}v_b^2, \tag{58.67 a}$$

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma = {} & N(c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma) + \delta_{\alpha,-\beta}S_\alpha v_a u_a N(c_\delta c_\gamma) \\ & + \delta_{\gamma,-\delta}S_\gamma v_c u_c N(c_\alpha^\gamma c_\beta^\dagger) + 2\delta_{\alpha\gamma}v_c^2 N(c_\beta^\dagger c_\delta) \\ & - 2\delta_{\alpha\delta}v_a^2 N(c_\beta^\dagger c_\gamma) + \delta_{\alpha,-\beta}\delta_{\gamma,-\delta}S_\alpha S_\gamma v_a u_a v_c u_c \\ & + (\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})v_a^2 v_b^2. \end{aligned} \tag{58.67 b}$$

对所有指标求和后，上式是正确的. 所得的 $\hat{K}$ 的表示式可利用势的下列一般对称性质大为简化:

$$1.\ \langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle = \langle\beta\alpha|V|\delta\gamma\rangle, \tag{58.68}$$

$$2.\ \langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle = S_\alpha S_\beta S_\gamma S_\delta \times \langle -\gamma -\delta|V|-\alpha-\beta\rangle, \tag{58.69}$$

这来自时间反演不变; 在

$$V = V_0(x_{12}) + V_1(x_{12})\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

的特例中可以给出显式的证明(见习题 15.13).

$$\begin{aligned} 3.\ \langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle = {} & \sum_{JM}\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta|j_\alpha j_\beta JM\rangle \\ & \times\langle j_\gamma m_\gamma j_\delta m_\delta|j_\gamma j_\delta JM\rangle \\ & \times\langle abJ|V|cdJ\rangle \end{aligned} \tag{58.70}$$

这来自 V 的转动不变性.

$$4.\ \langle abJ|V|cdJ\rangle = \langle cdJ|V|abJ\rangle, \tag{58.71}$$

这来自 2 和 3 以及 Clebsch-Gordan 系数的对称性质.

前面的表示式可以结合起来给出

$$\hat{K} = \hat{U} + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3, \tag{58.72}$$

这里

$$\hat{H}_3 = -\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle N(c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma), \tag{58.73}$$

而其余的项则是方程 (58.63) 中剩下的那些项. 利用恒等式

[见方程 (B.20b)]

$$\sum_{m_\alpha m_\beta} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta JM \rangle \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta JM \rangle = 1,$$

和

$$\sum_{m_\alpha} \frac{S_\alpha}{(2j_\alpha + 1)^{1/2}} \langle j_\alpha m_{\alpha j} - m_\alpha | j_\alpha j_\alpha JM \rangle$$

$$= \sum_m \langle jmj - m | jj00 \rangle \langle jmj - m | jjJM \rangle$$

$$= \delta_{J0}\delta_{M0},$$

方程 (58.63) 中的 c 数项可写成

$$U = \sum_\alpha v_\alpha^2 \left(T_\alpha - \mu + \frac{1}{2} V_\alpha \right) - \frac{1}{2} \sum_\alpha v_\alpha u_\alpha \Delta_\alpha, \quad (58.74)$$

这里的单粒子势已定义为[1]

$$V_\alpha \equiv - \sum_b \sum_J \frac{2J+1}{2j_\alpha + 1} [\langle abJ | V | abJ \rangle - (-1)^{j_a + j_b - 1}$$

$$\times \langle abJ | V | baJ \rangle] v_b^2, \quad (58.75)$$

而能隙函数定义为

$$\Delta_\alpha \equiv \frac{1}{(2j_\alpha + 1)^{1/2}} \sum_c (2j_c + 1)^{\frac{1}{2}} \langle aa0 | V | cc0 \rangle v_c u_c. \quad (58.76)$$

正比于 $N(c^\dagger c)$ 的项给出 A 和 $A^\dagger$ 的双线性项，它可以用恒等式

$$\sum_M \sum_{m_\alpha} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta JM \rangle \langle j_\alpha m_\alpha j_\delta m_\delta | j_\alpha j_\delta JM \rangle$$

$$= \frac{2J+1}{[(2j_\beta + 1)(2j_\delta + 1)]^{1/2}}$$

$$\times \sum_M \sum_{m_\alpha} \langle JM j_\alpha - m_\alpha | Jj_\alpha j_\beta m_\beta \rangle$$

1) 为了强调 V_α 和 Δ_α 与 m_α 无关，我们采用缩写记号 $j_\alpha \equiv j_\alpha$，等.

$$\times \langle JM j_\alpha - m_\alpha | J j_\alpha j_\delta m_\delta \rangle$$
$$= \frac{2J+1}{2j_\beta+1}\delta_{j_\beta j_\delta}\delta_{m_\beta m_\delta}$$

加以简化. 此外,在空间反射下, $V(1,2)$ 是不变的,而宇称守恒意味着在矩阵元 $\langle abJ|V|adJ\rangle$ 中 $l_\beta = l_\delta$. ($l_\beta = l_\delta \pm 2$ 的可能性为 $j_\beta = j_\delta$ 所排除.)因而在两个邻近的谐振子壳层的子空间中可以写出

$$\sum_M \sum_{m_\alpha} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta JM \rangle \langle j_\alpha m_\alpha j_\delta m_\delta | j_\alpha j_\delta JM \rangle$$
$$= (2J+1)/(2j_\beta+1)\delta_{\beta\delta}.$$

根据完全同样的论证,正比于 $N(cc)$ 和 $N(c^\dagger c^\dagger)$ 的项可分别用代换

$$\langle j_\gamma m_\gamma j_\delta m_\delta | j_\gamma j_\delta 00 \rangle \to \frac{S_\gamma \delta_{\gamma,-\delta}}{(2j_c+1)^{1/2}},$$

$$\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta 00 \rangle \to \frac{S_\alpha \delta_{\alpha,-\beta}}{(2j_a+1)^{1/2}}$$

简化[参阅方程 (B.20b)]. 按这方式,我们得到

$$\hat{H}_1 = \sum_\alpha [(u_\alpha^2 - v_\alpha^2)(\epsilon_\alpha - \mu) + 2u_\alpha v_\alpha \Delta_\alpha]$$
$$\times \frac{1}{2}(A_\alpha^\dagger A_\alpha + A_{-\alpha}^\dagger A_{-\alpha}), \qquad (58.77\,a)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_\alpha S_\alpha [2u_\alpha v_\alpha(\epsilon_\alpha - \mu) - (u_\alpha^2 - v_\alpha^2)\Delta_\alpha]$$
$$\times \frac{1}{2}(A_\alpha^\dagger A_{-\alpha}^\dagger + A_{-\alpha} A_\alpha). \qquad (58.77\,b)$$

这里定义了一个新的单粒子能量

$$\epsilon_\alpha \equiv T_\alpha + V_\alpha. \qquad (58.78)$$

这些方程的分析现在完全像在第 37 节中那样进行. 定

义相对于化学势的能量

$$\xi_a \equiv \varepsilon_a - \mu, \tag{58.79}$$

并且选择 u 和 v 使 $\hat{H}_2$ 消去；这导致

$$\hat{K} = \hat{K}_0 - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle N(c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma), \tag{58.80}$$

这里

$$\hat{K}_0 \equiv U + \sum_a (\xi_a^2 + \Delta_a^2)^{\frac{1}{2}} A_a^\dagger A_a, \tag{58.81}$$

而

$$\Delta_a = \frac{1}{2}\sum_c \left(\frac{2j_c+1}{2j_a+1}\right)^{\frac{1}{2}} \times \langle aa0|V|cc0\rangle \frac{\Delta_c}{(\Delta_c^2+\xi_c^2)^{1/2}}. \tag{58.82}$$

顺便指出，能隙方程的正常解

$$\Delta = 0, \quad u_c = \theta(c-F), \quad v_c = \theta(F-c); \tag{58.83}$$

重新给出第 56 节的结果. 然而，在我们的子空间中，无需假定单粒子波函数满足 Hartree-Fock 方程. 需要的仅仅是这些态为量子数 $\{ljm_j\}$ 所完全地表征[1].

方程 (58.81) 中的算符 $\hat{K}_0$ 是对角的，其基态 $|\mathbf{O}\rangle$ 满足方程

$$A_a|\mathbf{O}\rangle = 0. \tag{58.84}$$

如果 $\hat{K}$ 的严格基态用 $\hat{K}_0$ 的基态来近似，则系统的热力学势由下式给出

---

1) 这里的讨论只考虑一组有限制的基底态中的粒子间的相互作用，但是它容易推广到还包括有一个惰性核心的情况. 从其与核心的相互作用所决定的 Hartree-Fock 波函数出发[见方程 (56.16) 到 (56.24)]，然后对附加的价粒子进行 Bogoliubov 变换. 如果 T_a 附加上与核心相互作用的 Hartree-Fock 能

$$T_a \to T_a + V_a^{核},$$

则本节的结果正确地描述这些价粒子的性质.

$$\Omega(T=0,V,\mu)\approx\langle\mathbf{O}|\hat{K}|\mathbf{O}\rangle$$
$$=\langle\mathbf{O}|\hat{K}_0|\mathbf{O}\rangle=U(V,\mu). \qquad (58.85)$$

粒子数算符

$$\hat{N}=\sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha$$
$$=\sum_\alpha[(u_\alpha^2-v_\alpha^2)A_\alpha^\dagger A_\alpha+u_\alpha v_\alpha S_\alpha(A_\alpha^\dagger A_{-\alpha}^\dagger+A_{-\alpha}A_\alpha)+v_\alpha^2] \qquad (58.86)$$

在状态 $|\mathbf{O}\rangle$ 的期待值是

$$N=\sum_\alpha v_\alpha^2=\sum_\alpha\frac{1}{2}\left[1-\frac{\xi_\alpha}{(\Delta_\alpha^2+\xi_\alpha^2)^{1/2}}\right], \qquad (58.87)$$

因而，占据数在 $\varepsilon_\alpha=\mu$ 处又是连续的．这一方程可用来消去 μ 而以 N 表示出来．

与原子核物理直接有关的量，是 N 固定时的能量．对于 $\hat{K}_0$ 的基态，这个能量可由如下关系得出

$$E(N)=\langle\mathbf{O}|\hat{K}+\mu\hat{N}|\mathbf{O}\rangle$$
$$=\langle\mathbf{O}|\hat{K}_0|\mathbf{O}\rangle+\mu N=U+\mu N, \qquad (58.88)$$

这里 $\mu(N)$ 由方程 (58.87) 定出．系统的激发态是通过对基态上加上准粒子而得到的；它具有如下形式

$$|\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2\cdots\rangle=(A_1^\dagger)^{n_1}(A_2^\dagger)^{n_2}\cdots|\mathbf{O}\rangle,$$

这时，有 n_1 个准粒子在单粒子态 1 上，n_2 个准粒子在单粒子态 2 上，依此类推．显然，$n_i=0$ 或 1．对于确定的 μ，这些激发态各有一个稍微不同的 $\hat{N}$ 的期待值．因而我们考虑稍有不同的各种化学势 μ_{ex} 的系集的集体，在每种情况下，

$$\langle\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2\cdots|\hat{N}|\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2\cdots\rangle=N.$$

在目前的近似下，这些态的激发能由下式给出

$$\Delta E^*(N)=\langle\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2\cdots|\hat{K}_0+\mu_{ex}\hat{N}|\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2\cdots\rangle-\langle\mathbf{O}|\hat{K}_0+\mu\hat{N}|\mathbf{O}\rangle$$
$$=\sum_\alpha(\xi_\alpha^2+\Delta_\alpha^2)_{ex}^{1/2}n_\alpha$$
$$+[U(\mu_{ex})-U(\mu)+(\mu_{ex}-\mu)N]. \qquad (58.89)$$

对于准粒子数很小的情况，方程 (18.30) 和 (58.85) 意味着方括号内的项为零；此外，利用从态 $|\mathbf{O}\rangle$ 得出的 μ，可以算出 n_α 的系数．这样，如果 $\sum_\alpha n_\alpha$ 足够小，我们就得出如下重要结果

$$\Delta E^*(N) = \sum_\alpha (\xi_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2)^{\frac{1}{2}} n_\alpha, \qquad (58.90)$$

这里 $\mu(N)$ 由方程 (58.87) 决定．

现在可以把这些想法应用于偶核和奇核．$\hat{K}_0$ 的基态被验明就是偶偶 $J^\pi = O^+$ 核的基态[1]．由于状态 $|\alpha\rangle = A_\alpha^\dagger|\mathbf{O}\rangle$ 的分量中粒子数改变为 1，并且它的 J 值为奇的半整数，因而它属于奇核．为了激发原来的偶核，至少要产生两个准粒子，这些激发的谱 [方程 (58.90)] 是从基态能量以上至少 $2\Delta_{\min}$ ($2\Delta_a$，$2\Delta_b$ 等等的极小值)的能量开始的．这样的模型在偶核中导致能隙 $2\Delta_{\min}$．

对于奇核，取态 $|\alpha\rangle = A_\alpha^\dagger|O\rangle$ 作为基态，可以重复前面的全部讨论．在这种情况下，

$$\begin{aligned} \Omega(T=0, V, \mu) &\approx \langle\alpha|\hat{K}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{K}_0|\alpha\rangle \\ &= U + (\xi_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2)^{\frac{1}{2}}, \\ N &= (u_\alpha^2 - v_\alpha^2) + \sum_\beta v_\beta^2 \qquad (58.91) \\ E(N) &= \langle\alpha|\hat{K} + \mu\hat{N}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{K}_0|\alpha\rangle + \mu N \\ &= U + (\xi_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2)^{\frac{1}{2}} + \mu N. \end{aligned}$$

为了得到奇核的激发态，我们可以在 j_a 壳层上再加上一些准粒子对．然而，还有另外一类激发态，是通过简单地把单个准粒子从原来的 j_a 壳层提高到一个新的 j_b 壳层而得到的．这些态的激发能由下式给出，

---

1) 可以证明(见习题 15.14)态 $|\mathbf{0}\rangle$ 确实具有 $J^\pi = O^+$．

$$\Delta E^*(N) = (\xi_b^2 + \Delta_b^2)^{\frac{1}{2}} - (\xi_a^2 + \Delta_a^2)^{\frac{1}{2}}. \qquad (58.92)$$

我们得出结论：在这一模型中，奇核没有能隙[1]. 有一些证据表明，这一模型确实可以描述重核[2]，例如，锡或铅的同位素族[3].

任意的多极算符在奇核的这些低的(单个准粒子)态之间的矩阵元可以立即算出. 一般的张量算符的 $Q = 0$ 分量可以写成

$$\begin{aligned}\hat{T}_{K0} &= \sum_{\alpha\beta} c_\beta^\dagger \langle \beta | T_{K0} | \alpha \rangle c_\alpha \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \beta | T_{K0} | \alpha \rangle (u_b A_\beta^\dagger + v_b S_\beta A_{-\beta})(u_a A_\alpha + v_a S_\alpha A_{-\alpha}^\dagger) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \beta | T_{K0} | \alpha \rangle [N(c_\beta^\dagger c_\alpha) + v_b^2 \delta_{\beta\alpha}]. \qquad (58.93)\end{aligned}$$

$\hat{T}_{K0}$ 的期待值由下式给出

$$\begin{aligned}\langle \alpha | \hat{T}_{K0} | \alpha \rangle &= \langle \alpha | T_{K0} | \alpha \rangle u_a^2 - \langle -\alpha | T_{K0} | -\alpha \rangle v_a^2 \quad (K \neq 0) \\ &= \langle \alpha | T_{K0} | \alpha \rangle [u_a^2 - (-1)^K v_a^2].\end{aligned}$$

因而我们求得

$$\langle \alpha | \hat{T}_{K0} | \alpha \rangle = \begin{cases} \langle \alpha | T_{K0} | \alpha \rangle & (K \text{ 奇}), \quad (58.94\text{ a}) \\ \dfrac{\xi_a}{(\xi_a^2 + \Delta_a^2)^{1/2}} \langle \alpha | T_{K0} | \alpha \rangle & \begin{pmatrix} K \text{ 偶} \\ K \neq 0 \end{pmatrix}. \quad (58.94\text{ b}) \end{cases}$$

奇多极不因配对而改变，偶多极则因配对而再次减小，而当 $\varepsilon < \mu$ (即对于空穴)，成为负的. 这些结果应与方程 (58.23) 相比较. 类似的结果对 j 不同的壳层之间的跃迁多极子也成立，

$$\langle \beta | \hat{T}_{K0} | \alpha \rangle = \langle \beta | T_{K0} | \alpha \rangle u_b u_a - \langle -\alpha | T_{K0} | -\beta \rangle v_a v_b S_{-\alpha} S_{-\beta},$$

---

1) 球状原子核的典型激发能，对于偶 A 核约为 1 兆电子伏，对于奇 A 核则为几百个千电子伏.

2) A. Bohr, B. R. Motlleson, and D. Pines, *Phys. Rev.*, **110**:936(1958)

3) L. S. Kisslinger and R. A. Sorenson, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat-Fys. Medd*, **32**, No. 9 (1960).

$$\langle \mathbf{j}_b \| \hat{T}_K \| \mathbf{j}_a \rangle = \langle j_b \| T_K \| j_a \rangle u_b u_a + (-1)^{j_a+j_b+K} \langle j_a \| T_K \| j_b \rangle v_b v_a. \quad (58.95)$$

这里的方法，使我们能在起始近似中就把配对相互作用算进去. 为了理解这个近似的有效性及其含意，考虑单个 j 壳层，其中有 N 个粒子通过一个纯吸引的配对力 ($G > 0$) 相互作用，

$$\langle j^2 J | V | j^2 J \rangle = G\delta_{J0}. \quad (58.96)$$

这精确地就是前节已解出的问题，它的严格的谱是式 (58.51). 由于我们现在只有一个单粒子能级，而 v，u，Δ 以及 ξ 都已与 m 无关，所有下标全可略去. 于是，方程 (58.87) 中的求和就再简单不过了；这样，化学势 $\mu(N)$ 由如下关系式决定

$$N = (2j+1)v^2 = (2j+1)\frac{1}{2}\left[1 - \frac{\xi}{(\xi^2+\Delta^2)^{1/2}}\right], \quad (58.97)$$

它确定了系数 u 和 v：

$$v = \left(\frac{N}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad u = \left(1 - \frac{N}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}},$$

符号像第 37 节中那样选定. 类似地，能隙方程成为如下的简单条件，

$$(\Delta^2 + \xi^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}G. \quad (58.98)$$

方程 (58.97) 和 (58.98) 的结合给出，

$$\xi = \frac{G}{2}\left(1 - \frac{2N}{2j+1}\right), \quad (58.99)$$

$$\Delta = G\left(\frac{N}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1 - \frac{N}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (58.100)$$

方程 (58.74) 中的热力学势成为

$$U = N\left(t - \mu + \frac{1}{2}V\right) - \frac{1}{2}(2j+1)uv\Delta,$$

这里 $t \equiv T_\alpha$ 是 j 壳层中一个粒子的能动，而由方程(58.75)，

$$V = -\frac{2}{2j+1}Gv^2$$

$$= -\frac{2GN}{(2j+1)^2}. \qquad (58.101)$$

因而新的基态能量 E，可用 G 和 N 给出，

$$E - Nt = U + N\mu - Nt$$

$$= -\frac{G}{2}\frac{N}{2j+1}\left(1 - \frac{N}{2j+1}\right)$$

$$\times (2j+1) - \frac{GN^2}{(2j+1)^2},$$

或

$$E - Nt = -G\frac{N}{2}\left[1 - \frac{N}{2j+1} + \frac{2N}{(2j+1)^2}\right].$$

(Bogoliubov) (58.102)

这应该与从方程 (58.50) 以及 (58.51) 所得出的严格表式

$$E - Nt = \left\{\begin{array}{l} -G\dfrac{N}{2}\left(1 - \dfrac{N}{2j+1} + \dfrac{2}{2j+1}\right), \\ \qquad (N\text{偶}) \\ -G\dfrac{N}{2}\left[1 - \dfrac{N}{2j+1} + \dfrac{2}{2j+1}\right. \\ \qquad \left. -\dfrac{1}{N}\left(1 + \dfrac{1}{2j+1}\right)\right] (N\text{奇}) \end{array}\right\}\text{(严格表式)} \qquad (58.103)$$

相比较．在可用的态很多 $(2j+1 \to \infty)$ 但允许这些态的有限的部分占据 $[N/(2j+1) \to$ 有限数]的极限下，上面得出的每个粒子能量的两个数值相重合，

$$\frac{E}{N} \to t - \frac{G}{2}\left(1 - \frac{N}{2j+1}\right). \qquad (58.104)$$

注意方程 (58.79), (58.99) 和 (58.101) 意味着

$$\mu = t + V - \xi$$

$$= t - \frac{G}{2}\left[1 - \frac{2N}{2j+1} + \frac{4N}{(2j+1)^2}\right], \quad (58.105)$$

与热力学关系

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right),$$

以及方程 (58.102) 相一致.

对单一 j 壳层附加一些准粒子就得到激发谱. 只要准粒子总数 $n_q = \sum_a n_a$ 是很小的数,则对于固定的 N, 每个准粒子对能量作出贡献为 $(\Delta^2 + \xi^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}G$ [见方程 (58.90)]. 根据前面的论证,加一个准粒子就把偶核变为奇核. 这样,给定的核的谱包含偶数 n_q 个准粒子,而激发能为

$$\Delta E^*(N) = \frac{1}{2} G n_q. \quad (58.106)$$

如果我们指认 n_q 为高位数 σ, 则在 $n_q = \sigma \ll 2j + 1$ 的极限下;这个谱与方程 (58.51) 的严格谱一致. 此外,对于 $\sigma = 2$, 方程 (58.106) 是严格的, 因为具有纯配对力的偶核的第一激发态与基态的间隔恰好是 G. 注意这个简单模型只有一个单粒子能级可用,这意味着奇核的能谱中也具有能隙.

我们曾指出过, 加上准粒子使 N 的期待值稍有改变. 虽然在得出方程 (58.90) 时只对这个效应作了近似的处理, 这里的有限制的模型,却使我们可以就所有的 n_q 把方程(58.89)的分析严格地进行到底. 粒子数算符的期待值 [参见方程 (58.86)] 是

$$N = \langle \mathbf{n}_q | \hat{N} | \mathbf{n}_q \rangle = (2j+1)v^2 + (u^2 - v^2)n_q.$$

这样, v^2 依赖于准粒子数

$$v^2 = \frac{N - n_q}{2j + 1 - 2n_q}.$$

利用这个新的 v^2 重复上面的讨论，给出

$$U(\mu_{cx}) + \mu_{cx}N = N\left(t - \frac{G}{2}\right) + (2j - 1)G\,\frac{N - n_q}{2j + 1 - 2n_q} \times \left(\frac{N}{2j + 1} - \frac{1}{2}\,\frac{N - n_q}{2j + 1 - 2n_q}\right),$$

对于任意的 n_q，这都是正确的，并且在 $n_q \to 0$ 的极限下重新给出方程 (58.102)．对于固定的 N，激发能由方程(58.89)得到，按 $\frac{n_q}{2j + 1}$ 的幂次展开给出

$$\Delta E^*(N) = \frac{G}{2}n_q\left[1 - \frac{n_q}{2j + 1}\,\frac{2j - 1}{2j + 1} \times \left(\frac{2j + 1 - 2N}{2j + 1}\right)^2 + O\left(\frac{n_q}{2j + 1}\right)^2\right].$$

这个结果包含了 n_q 很小时对方程 (58.90) 的第一级改正．假定 j 是很大的，但 j 壳层或者接近于填满或者几乎是空的，因而

$$[(2j + 1 - 2N)/(2j + 1)]^2 \approx 1.$$

这一近似给出

$$\Delta E^*(N) \approx \frac{G}{2}n_q\left(1 - \frac{n_q}{2j + 1}\right). \qquad (58.107)$$

严格结果 [方程 (58.51)] 由下式给出，可供比较，

$$\Delta E^*(N) = \frac{G}{2}n_q\left(1 - \frac{n_q - 2}{2j + 1}\right), \qquad (58.108)$$

这里我们再次指认 $\sigma \equiv n_q$．在热力学极限下，$2j+1 \to \infty$ 而 $n_q/(2j + 1)$为有限，上面两个表示式是一致的，直到第一级改

正项.

研究N的涨落（比较习题10.6）还可以来检验核谱的Bogoliubov 方法的适用性.

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{O}|\hat{N}^2|\mathbf{O}\rangle - \langle \mathbf{O}|\hat{N}|\mathbf{O}\rangle^2 &= \sum_{n\neq 0}|\langle \mathbf{n}|\hat{N}|\mathbf{O}\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\alpha}\left|\langle \boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\alpha}|\sum_{\beta}S_\beta u_b v_b A_\beta^\dagger A_{-\beta}^\dagger|\mathbf{O}\rangle\right|^2 \\ &= 2\sum_{a}u_a^2 v_a^2,\end{aligned}$$

这导致一般结果

$$\frac{\langle \hat{N}^2\rangle - \langle \hat{N}\rangle^2}{\langle \hat{N}\rangle^2} = \frac{2\sum_a u_a^2 v_a^2}{\left(\sum_a v_a^2\right)^2}. \tag{58.109}$$

在具有纯配对力的单一 j 壳层的情况下，方程 (58.109) 可以简化而给出

$$\frac{\langle \hat{N}^2\rangle - \langle \hat{N}\rangle^2}{\langle \hat{N}\rangle^2} = \frac{2}{N}\left(1 - \frac{N}{2j+1}\right). \tag{58.110}$$

只有这个表示式很小时，理论才有意义；而只要N足够大，这一表示式就确实很小.

总之，我们作出结论：对角化的热力学势

$$\hat{K}_0 = U + \sum_a (\xi^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}} A_a^\dagger A_a \tag{58.111}$$

在极限

$$\frac{N}{2j+1}\text{固定}，\ 2j+1\to\infty，\ n_q \ll 2j+1 \tag{58.112}$$

下，正确地描述具有纯配对相互作用的 j^N 组态 [方程 (58.96)].

59. 激发态：运动方程的线性化[1)]

上面我们讨论了多粒子壳层模型的理论基础，现在我们回到较为一般的问题上来，考虑在有限的相互作用系集的 Hartree-Fock 基态之上建立的集体激发．在本节中，假定基态只包含闭壳层．如果系统是由粒子数守恒的单体算符的一次作用而激发，则得出的态必定有单个粒子从基态被提升到较高壳层，或者等价地说，必须包含一个粒子-空穴对．因而我们可以期望把强激发集体振荡描述为粒子-空穴态的某种一般的线性组合．这个过程现在将用两步近似来完成。

Tamm-Dancoff 近似（TDA）

我们先构成粒子-空穴对产生算符

$$\xi^{\dagger}_{\alpha\beta} \equiv a^{\dagger}_{\alpha} b^{\dagger}_{\beta}, \tag{59.1}$$

它把一个粒子从已填充的态移走，并把它提升到一个激发态上．考虑矩阵元

$$\langle \Psi_n | [\hat{H}, \zeta^{\dagger}_{\alpha\beta}] | \Psi_0 \rangle = (E_n - E_0) \langle \Psi_n | \hat{\zeta}^{\dagger}_{\alpha\beta} | \Psi_0 \rangle, \tag{59.2}$$

这里 $|\Psi_0\rangle$ 是方程 (56.18) 中哈密顿函数 $\hat{H}$ 的严格基态，而 $|\Psi_n\rangle$ 是一个严格的激发态．上式左边可以改写，这只要算出下列对易式，

$$[H_0, \hat{\zeta}^{\dagger}_{\alpha\beta}] = 0, \tag{59.3 a}$$

$$[\hat{H}_1, \hat{\zeta}^{\dagger}_{\alpha\beta}] = \left[\left(\sum_{\alpha>F} \epsilon_{\alpha} a^{\dagger}_{\alpha} a_{\alpha} - \sum_{\alpha<F} \epsilon_{\alpha} b^{\dagger}_{-\alpha} b_{-\alpha}\right), \hat{\zeta}^{\dagger}_{\alpha\beta}\right]$$

$$= (\epsilon_{\alpha} - \epsilon_{-\beta}) \hat{\zeta}^{\dagger}_{\alpha\beta}, \tag{59.3 b}$$

---

1) 关于多体技术对核谱学的应用的较详细的讨论，可以在下列书中找到：A.M. Lane, 前引书，M. Baranger 前引书，以及 G. E. Brown, "Unified Theory of Nuclear Models", North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1964.

$$[\hat{H}_1, \xi^\dagger_{\alpha\beta}] = \frac{1}{2}\sum_{\rho\sigma\mu\nu}\langle\rho\sigma|V|\mu\nu\rangle[N(c^\dagger_\rho c^\dagger_\sigma c_\nu c_\mu), a^\dagger_\alpha b^\dagger_\beta], \quad (59.3\,c)$$

这里最后一行的正规编序又是指粒子和空穴算符的编序

$$c_\alpha \equiv \theta(\alpha - F)a_\alpha + \theta(F - \alpha)S_\alpha b^\dagger_{-\alpha}. \quad (59.4)$$

前两个对易式是简单的，但最后一个一般说来是复杂的.

我们以方程 (59.3 c) 在 Tamm-Dancoff 近似 (TDA)[1] 中的计算作为开始，这里方程 (59.2) 中的容许态只限于闭壳层的 Hartree-Fock 基态

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle \quad (a_\alpha|0\rangle = b_\alpha|0\rangle = 0) \quad (59.5)$$

和粒子-空穴态的线性组合

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{\alpha\beta}\psi^{(n)*}_{\alpha\beta}\xi^\dagger_{\alpha\beta}|0\rangle. \quad (59.6)$$

在这情况下，方程 (59.3 c) 中的对易式可以只保留给出 $a^\dagger b^\dagger$ 的那些项而算出，因为所有其他算符在取近似的各态之间为零，就象在方程 (59.5) 和 (59.6) 中那样. 这些项成为

$$\begin{aligned}[N\{&S_\mu S_\sigma a^\dagger_\rho b_{-\sigma}a_\nu b^\dagger_\mu + S_\rho S_\nu b_{-\rho}a^\dagger_\sigma b^\dagger_{-\nu}a_\mu + S_\nu S_\sigma a^\dagger_\rho b_{-\sigma}b^\dagger_{-\nu}a_\mu \\ &+ S_\nu S_\mu b_{-\rho}a^\dagger_\sigma a_\nu b^\dagger_{-\mu}\}, a^\dagger_\alpha b^\dagger_\beta] \\ &= 2[(S_\mu S_\sigma a^\dagger_\rho b^\dagger_{-\mu}b_{-\sigma}a_\nu - S_\nu S_\sigma a^\dagger_\rho b^\dagger_{-\nu}b_{-\sigma}a_\mu), a^\dagger_\alpha b^\dagger_\beta],\end{aligned}$$

这里利用了对称性 $\langle\rho\sigma|V|\mu\nu\rangle = \langle\sigma\rho|V|\nu\mu\rangle$. 对易式容易算出从而给出

$$\begin{aligned}[\hat{H}_2, \xi^\dagger_{\alpha\beta}] \doteq \sum_{\lambda\mu} S_{-\beta}S_{-\mu}[&\langle\lambda - \beta|V|-\mu\alpha\rangle \\ &- \langle\lambda - \beta|V|\alpha - \mu\rangle]\xi^\dagger_{\lambda\mu},\end{aligned} \quad (59.7)$$

这里记号 $\doteq$ 的意思是只有这些项对所考虑的矩阵元有贡献. 借助于关系式[见方程 (59.6)]

---

1) Tamm, *J. Phys.* (*USSR*), **9**: 449 (1945) and S. M. Dancoff, *Phys. Rev.*, **78**:382 (1950). 这些作者所关心的是介子-核子场论，并且是用截断的基底解出这一问题的. 但这是一种标准的方法，早先已用在许多其他方面.

$$\langle \Psi_n | \hat{\xi}^{\dagger}_{\alpha\beta} | \Psi_0 \rangle \equiv \phi^n_{\alpha\beta}, \tag{59.8}$$

在 Tamm-Dancoff 近似中，方程(59.2)最后可以写成量 $\phi^{(n)}_{\lambda\mu}$ 的一组线性齐次方程

$$[(E_0 + \varepsilon_\alpha - \varepsilon_{-\beta}) - E_n]\phi^{(n)}_{\alpha\beta} + \sum_{\lambda\mu} v_{\alpha\beta;\lambda\mu}\phi^{(n)}_{\lambda\mu} = 0, \tag{59.9}$$

$$v_{\alpha\beta;\lambda\mu} \equiv S_{-\beta}S_{-\mu}[\langle \lambda - \beta | V | - \mu\alpha \rangle - \langle \lambda - \beta | V | \alpha - \mu \rangle]. \tag{59.10}$$

令系数行列式等于零，就可得出本征值 E_n，相应的解则给出本征矢量的系数 $\phi^{(n)}_{\lambda\mu}$. 在这一表示式中，指标 $(\alpha\beta)$ 和 $(\lambda\mu)$ 表示粒子-空穴对，而矩阵元 $v_{\alpha\beta;\lambda\mu}$ 则代表粒子-空穴相互作用势，这势由方程 (59.10) 联系于粒子-粒子相互作用. 量 $\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{-\beta}$ 正是粒子-空穴对的未微扰 Hartree-Fock 激发能. 由于 Hartree-Fock 能 ε_α 是粒子与填满的基态的相互作用能量[见方程 (56.22) 到 (56.24)]，所以，粒子-空穴相互作用[方程 (59.10)]所起的作用是从中减去粒子与未被占据的态的相互作用.

激发态矢量，已在方程 (59.6) 中给出，现在我们可以利用恒等式

$$\langle 0 | \hat{\xi}_{\lambda\mu}\hat{\xi}^{\dagger}_{\alpha\beta} | 0 \rangle = \delta_{\lambda\alpha}\delta_{\beta\mu} \tag{59.11}$$

算出它们的内积

$$\langle \Psi_{n'} | \Psi_n \rangle = \sum_{\gamma\beta} \phi^{(n')}_{\alpha\beta}\phi^{(n)*}_{\alpha\beta} = \delta_{nn'}. \tag{59.12}$$

由此得到正交性，因为 $\phi^{(n)}_{\alpha\beta}$ 是一个厄米矩阵的第 n 个本征矢. 此外，方程 (59.9) 并不决定 $\phi^{(n)}_{\alpha\beta}$ 的归一化，但方程 (59.12) 提供适当的规定.

其次，考虑一个集体激发态与基态之间的一些多极算符的跃迁矩阵元

$$\hat{T} = \sum_{\alpha\beta} c^{\dagger}_{\alpha}\langle \alpha | T | \beta \rangle c_\beta \tag{59.13}$$

的计算问题. 在 Tamm-Dancoff 近似中，又得出 $\hat{T}$ 中只有 $a^\dagger b^\dagger$ 项对 $\langle \Psi_n|\hat{T}|\Psi_0\rangle$ 有贡献，我们求得

$$\hat{T} \doteq \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha|T|-\beta\rangle S_{-\beta}\hat{\zeta}^\dagger_{\alpha\beta}, \tag{59.14}$$

$$\langle \Psi_n|\hat{T}|\Psi_0\rangle = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha|T|-\beta\rangle S_{-\beta}\psi^{(n)}_{\alpha\beta}. \tag{59.15}$$

这样，跃迁矩阵元是单粒子矩阵元的带权和，权重是上面所定出的系数 $\psi^{(n)}_{\alpha\beta}$.

下面还将对 Tamm-Dancoff 近似作详细的讨论（包括一些应用），但是先要推广这个方法.

无规周相近似（RPA）

我们不用 TDA 中所考虑的态的系统，而运用更为普遍的态的系统，就可以得到一种改进了的近似. 特别是，我们较为对称地处理基态与激发态，允许两者都具有粒子-空穴对. 用这扩展了的基，运动方程仍然是线性化的. 采用同样的定义

$$\hat{\zeta}^\dagger_{\alpha\beta} \equiv a^\dagger_\alpha b^\dagger_\beta, \hat{\zeta}_{\alpha\beta} = b_\beta a_\alpha. \tag{59.16}$$

我们在运动方程中保留所有如下形式的矩阵元，

$$\psi^{(n)}_{\alpha\beta} \equiv \langle \Psi_n|\hat{\zeta}^\dagger_{\alpha\beta}|\Psi_0\rangle, \tag{59.17 a}$$

$$\varphi^{(n)}_{\alpha\beta} \equiv \langle \Psi_n|\hat{\zeta}_{\alpha\beta}|\Psi_0\rangle. \tag{59.17 b}$$

这条件的意思是有两种办法达到激发态，或者在基态中产生粒子-空穴对，或者破坏基态中的粒子-空穴对. 由于历史的原因. 这种规定叫做无规周相近似（RPA）[1].

下一节将提出这种近似的物理图象. 目前，我们只考虑矩阵元

---

1) D. Bohm and D. Pines, *Phys. Rev.*, **82**: 625 (1951)（参阅第 12 节中的讨论）. 这里所讨论的方法最初是 K. Sawada 在解决电子气问题时发展起来的，*Phys. Rev.*, **106**: 372 (1957).

$$\langle \Psi_n | [\hat{H}, \hat{\zeta}^\dagger_{\alpha\beta}] | \Psi_0 \rangle = (E_n - E_0)\phi^{(n)}_{\alpha\beta}, \quad (59.18\,a)$$

$$\langle \Psi_n | [\hat{H}, \hat{\zeta}_{\alpha\beta}] | \Psi_0 \rangle = (E_n - E_0)\varphi^{(n)}_{\alpha\beta}. \quad (59.18\,b)$$

左边的对易式已在方程 (59.3) 中写出. [注意 $[\hat{H}, \hat{\zeta}_{\alpha\beta}]$ 是由方程 (59.3) 的负伴随得出的]. 与 Tamm-Dancoff 近似相反，现在既保留方程 (59.3 c) 中所有给出 $a^\dagger b^\dagger$ 的项，也保留所有给出 ba 的项，因为这种步骤仍然给出线性的运动方程. 第一种贡献 ($\propto a^\dagger b^\dagger$) 是在 Tamm-Dancoff 近似的讨论中算出的；第二种只要求单项

$$[N\{S_\rho S_\sigma b_{-\rho} b_{-\sigma} a_\nu a_\mu\}, a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta]$$
$$\doteq 2[\delta_{\mu\alpha}\delta_{\beta,-\rho} b_{-\sigma} a_\nu - \delta_{\nu\alpha}\delta_{\beta,-\rho} b_{-\sigma} a_\mu] S_\rho S_\sigma. \quad (59.19)$$

这里又一次用到方程 (58.68) 的势的对称性. 这样我们求得近似表示式

$$[\hat{H}_2, \hat{\zeta}^\dagger_{\alpha\beta}] \doteq \sum_{\lambda\mu} \langle v_{\alpha\beta;\lambda\mu}\zeta^\dagger_{\lambda\mu} + u_{\alpha\beta;\lambda\mu}\hat{\zeta}_{\lambda\mu}\rangle, \quad (59.20)$$

$$u_{\alpha\beta;\lambda\mu} \equiv S_{-\beta}S_{-\mu}[\langle -\beta\ -\mu | V | \alpha\lambda\rangle$$
$$- \langle -\beta\ -\mu | V | \lambda\alpha\rangle], \quad (59.21)$$

而运动方程 (59.18) 成为

$$\{[E_0 + (\epsilon_\alpha - \epsilon_{-\beta})] - E_n\}\phi^{(n)}_{\alpha\beta}$$
$$+ \sum_{\lambda\mu} [v_{\alpha\beta;\lambda\mu}\phi^{(n)}_{\lambda\mu} + u_{\alpha\beta;\lambda\mu}\varphi^{(n)}_{\lambda\mu}] = 0, \quad (59.22\,a)$$

$$\{[E_0 - (\epsilon_\alpha - \epsilon_{-\beta})] - E_n\}\varphi^{(n)}_{\alpha\beta}$$
$$- \sum_{\lambda\mu} [v^*_{\alpha\beta;\lambda\mu}\varphi^{(n)}_{\lambda\mu} + u^*_{\alpha\beta;\lambda\mu}\phi^{(n)}_{\lambda\mu}] = 0, \quad (59.22\,b)$$

这又构成了一组线性齐次代数方程. 如果我们把Hartree-Fock单粒子波函数的完全集合取为束缚态加上具有驻波边界条件的连续态，则这表式中所有矩阵元都是实的[1]，

1) 在我们的应用中， Hartree-Fock 波函数是用谐振子的（束缚）态来近似的. 对于向连续态跃迁的讨论，参阅，例如， F. Villars and M. S. Weiss, *Phys. Letters*, **11**: 318 (1964) 和 J. Friar, *Phys. Rev.*, **C**:1 40 (1970)

$$v_{\alpha\beta;\lambda\mu} = v^*_{\alpha\beta;\lambda\mu} = v_{\lambda\mu;\alpha\beta}, \tag{59.23 a}$$

$$u_{\alpha\beta;\lambda\mu} = u_{\lambda\mu;\alpha\beta} = u^*_{\alpha\beta;\lambda\mu}. \tag{59.23 b}$$

在这种情况下，对应于两个不同的本征值 $E_n - E_0 > 0$ 的解满足如下正交关系

$$\sum_{\alpha\beta} [\psi^{(n')*}_{\alpha\beta}\psi^{(n)}_{\alpha\beta} - \varphi^{(n')*}_{\alpha\beta}\varphi^{(n)}_{\alpha\beta}] = \delta_{nn'}. \tag{59.24}$$

方程 (59.24)也意味着一种特殊的归一化；然而，这一选择的正确性的证明却是相当微妙的，现在将详细地讨论它[1]。

首先，我们注意到，当 $\varphi^{(n)}_{\alpha\beta} \to 0$，方程(59.22) 和 (59.24) 正确地归结为方程 (59.9) 和 (59.12)。在准玻色子近似的框架里[2]，还可以找到一种更有说服力的论断，来证明方程 (59.24)。到这里为止，我们只对矩阵元作了近似，但系数的归一化要求进一步的限制。定义算符

$$\hat{Q}^\dagger_n \equiv \sum_{\alpha\beta} [\psi^{(n)}_{\alpha\beta}\hat{\zeta}^\dagger_{\alpha\beta} - \varphi^{(n)}_{\alpha\beta}\hat{\zeta}_{\alpha\beta}]. \tag{59.25}$$

于是，与 $\hat{H}$ 的对易式给出

$$[\hat{H}, \hat{Q}^\dagger_n] \doteq (E_n - E_0)\hat{Q}^\dagger_n, \tag{59.26}$$

这里我们已用到线性化的规定：左边只保留正比于 $\hat{\zeta}^\dagger$ 或 $\hat{\zeta}$ 的各项 [方程 (59.3) 和 (59.20)]，而且还用了运动方程 (59.22) 和 (59.23)。现在假定方程 (59.26) 是作为算符恒等式成立的，而相互作用基态可由如下条件定义

$$\hat{Q}_n|\Psi_0| = 0, \quad (\text{对一切 } n). \tag{59.27}$$

集体激发可以构成如

$$|\Psi_n\rangle = \hat{Q}^\dagger_n|\Psi_0\rangle, \tag{59.28}$$

由于方程 (59.26)，这是 $\hat{H}$ 的本征态。这些本征态必须是正交归一化的：

---

1) M. Baranger，前引书。

2) 注意这里讨论的准玻色子是由粒子-空穴对组成的；在方程(58.57) 中，玻色子算符包含粒子对。

$$\langle\Psi_{n'}|\Psi_n\rangle = \delta_{nn'} = \langle\Psi_0|[\hat{Q}_n, \hat{Q}_n^\dagger]|\Psi_0\rangle. \quad (59.29)$$

如果代换

$$[\hat{\zeta}_{\alpha\beta}, \hat{\zeta}_{\lambda\mu}^\dagger] \doteq \delta_{\alpha\lambda}\delta_{\beta\mu} \quad (59.30)$$

是允许的，将方程 (59.25) 的定义式代入方程 (59.29) 就导致方程 (59.24) 的归一化条件. 直接计算对易式就能给出准玻色子描述的必要条件

$$\langle\Psi_0|a_\gamma^\dagger a_\gamma|\Psi_0\rangle \ll 1, \quad (59.31\,a)$$

$$\langle\Psi_0|b_\gamma^\dagger b_\gamma|\Psi_0\rangle \ll 1. \quad (59.31\,b)$$

为了解释这些条件，我们假定，真正的基态 $|\Psi_0\rangle$ 主要是由粒子-空穴真空$|0\rangle$加上 $J^\pi = 0^+$ 的少数别的粒子-空穴态的混合而组成的. 由于粒子数必须等于空穴数，方程 (59.31) 实际上是假定 $N_h/N \ll 1$，这里N是填满的核心的态的总数，而 N_h 则为$|\Psi_0\rangle$中平均空穴数，因为这时在 γ 态中找到一个空穴的概率是

$$\langle\Psi_0|b_\gamma^\dagger b_\gamma^\dagger|\Psi_0\rangle \approx \frac{N_h}{N} \ll 1. \quad (59.32)$$

这样，如果基态不包含太多空穴，归一化条件可以写成

$$\langle\Psi_0|[\hat{Q}_{n'}, \hat{Q}_n^\dagger]|\Psi_0\rangle = \sum_{\alpha\beta}[\phi_{\alpha\beta}^{(n')*}\phi_{\alpha\beta}^{(n)} - \varphi_{\alpha\beta}^{(n')*}\varphi_{\alpha\beta}^{(n)}]$$
$$= \delta_{nn'}. \quad (59.33)$$

由一个激发态向基态跃迁的多极算符跃迁矩阵元，立即可以算出. 在无规周相近似中，只有 $\hat{T}$ 的包含 $a^\dagger b^\dagger$ 或者 ba 的项才对 $\langle\Psi_n|\hat{T}|\Psi_0\rangle$ 作出贡献，我们求得

$$\hat{T} \doteq \sum_{\alpha\beta}[\langle\alpha|T|-\beta\rangle S_{-\beta}\hat{\zeta}_{\alpha\beta}^\dagger + \langle-\beta|T|\alpha\rangle S_{-\beta}\hat{\zeta}_{\alpha\beta}], \quad (59.34)$$

$$\langle\Psi_n|\hat{T}|\Psi_0\rangle = \sum_{\alpha\beta} S_{-\beta}[\langle\alpha|T|-\beta\rangle\phi_{\alpha\beta}^{(n)}$$
$$+ \langle-\beta|T|\alpha\rangle\varphi_{\alpha\beta}^{(n)}]. \quad (59.35)$$

方程(59.35)又是单粒子矩阵元的带权和，权重是上面定出的系数 $(\psi^{(n)}_{\alpha\beta}\varphi^{(n)}_{\alpha\beta})$.

基的约化

注意到 J 是一个好的量子数，矩阵方程(59.22)的维数可以大大地降低. 利用系统的转动不变性，假定 $\{\alpha\}=\{nljm_j\}$ 并定义

$$\hat{\zeta}^{\dagger}(abJM)\equiv\sum_{m_\alpha m_\beta}\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta|j_\alpha j_\beta JM\rangle\hat{\zeta}^{\dagger}_{\alpha\beta}, \quad (59.36)$$

这是一个秩为 J 的不可约张量算符. 与此相反，$\zeta(abJM)$ 不是不可约张量算符，虽然我们已经看到 $(-1)^{j_\alpha-m_\alpha}a_{-\alpha}$ 和 $(-1)^{j_\beta-m_\beta}b_{-\beta}$ 是张量算符. 这一缺陷容易用如下恒等式加以补救，

$$\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta|j_\alpha j_\beta JM\rangle=(-1)^{j_\alpha+j_\beta-J}\langle j_\alpha-m_\alpha j_\beta-m_\beta|j_\alpha j_\beta J-M\rangle, \quad (59.37)$$

这表明 $S_J\hat{\zeta}(abJ-M)$ 是秩为 J 的张量，其中

$$S_J\equiv(-1)^{J-M}. \quad (59.38)$$

这样，我们进一步定义

$$\psi^{(n)}_J(ab)\equiv\langle\Psi^n_{JM}|\hat{\zeta}^{\dagger}(abJM)\Psi_0\rangle=\sum_{m_\alpha m_\beta}\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta|j_\alpha j_\beta JM\rangle\psi^{(n)}_{\alpha\beta}, \quad (59.39\ a)$$

$$\varphi^{(n)}_J(ab)\equiv S_J\langle\Psi^n_{JM}|\hat{\zeta}(abJ-M)|\Psi_0\rangle=S_J\sum_{m_\alpha m_\beta}\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta|j_\alpha j_\beta J-M\rangle\varphi^{(n)}_{\alpha\beta}, \quad (59.39\ b)$$

根据 Wigner-Eckart 定理，它们与M无关. 按这方式，方程(59.34)中的一般的多极算符可借助 Wigner-Eckart 定理写成

$$\hat{T}_{JM} \doteq \frac{1}{(2J+1)^{1/2}} \sum_{\alpha\beta} \{S_{-\beta}^{2}\langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta JM\rangle$$
$$\times \langle a\|T_J\|b\rangle \hat{\zeta}_{\alpha\beta}^{\dagger} + S_\alpha S_{-\beta} \cdot$$
$$\times \langle j_\beta - m_\beta j_\alpha - m_\alpha | j_\beta j_\alpha JM\rangle \langle b\|T_J\|a\rangle \hat{\zeta}_{\alpha\beta}\}$$
$$\doteq \frac{1}{(2J+1)^{1/2}} \sum_{ab} \{\langle a\|T_J\|b\rangle \hat{\zeta}^{\dagger}(abJM)$$
$$+ (-1)^{j_b - j_a - J} \langle b\|T_J\|a\rangle S_J \hat{\zeta}(abJ-M)\}, \quad (59.40)$$

由此可得

$$\langle \Psi_J^n \| \hat{T}_J \| \Psi_0 \rangle = \sum_{ab} \{\langle a\|T_J\|b\rangle \psi_J^{(n)}(ab)$$
$$+ (-1)^{j_b - j_a - J} \langle b\|T_J\|a\rangle \varphi_J^{(n)}(ab)\}. \quad (59.41)$$

我们现在可以约化线性方程组(59.22)的基，即用 Cebsch-Gordan 系数进行方程 (59.39) 中的求和. 对于球状系统，$\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{-\beta} = \varepsilon_a - \varepsilon_b$，并且方程 (59.22) 的第一项立即给出 $\psi_J^{(n)}(ab)$ 和 $\varphi_J^{(n)}(ab)$. 相互作用项比较复杂. 由于相互作用势在转动下不变[比较方程 (58.70)]，可以写出

$$v_{\alpha\beta;\lambda\mu} = \sum_{J'M'} S_{-\beta} S_{-\mu} \langle j_\lambda m_\lambda j_\beta - m_\beta | j_\lambda j_\beta J'M'\rangle$$
$$\times \langle j_\mu - m_\mu j_\alpha m_\alpha | j_\mu j_\alpha J'M'\rangle \{\langle lbJ' | V | maJ'\rangle$$
$$- (-1)^{j_a + j_m - J'} \langle lbJ' | V | amJ'\rangle\}, \quad (59.42\,a)$$

$$u_{\alpha\beta;\lambda\mu} = \sum_{J'M'} S_{-\beta} S_{-\mu} \langle j_\mu - m_\mu j_\beta - m_\beta | j_\mu j_\beta J'M'\rangle$$
$$\times \langle j_\lambda m_\lambda j_\alpha m_\alpha | j_\lambda j_\alpha J'M'\rangle \{\langle mbJ' | V | laJ'\rangle$$
$$- (-1)^{j_a + j_l - J'} \langle mbJ' | V | alJ'\rangle\}. \quad (59.42\,b)$$

在这些表示式中，(ab) 和 (lm) 表示用以认别粒子-空穴对的其余量子数，例如 $(ab) \equiv (n_a l_a j_a, n_b l_b j_b)$. 在把 $v_{\alpha\beta;\lambda\mu}$ 乘以方程 (59.39 a) 中的 Clebsch-Gordan 系数然后求和时，我们利用关系式

$$\sum_{m_\alpha m_\beta M'} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta J M\rangle \langle j_\lambda m_\lambda j_\beta - m_\beta | j_\lambda j_\beta J' M'\rangle$$

$$\times \langle j_\mu - m_\mu j_\alpha m_\alpha | j_\mu j_\alpha J' M'\rangle S_{-\beta}$$

$$= (-1)^{J'-j_l-j_b}\left(\frac{2J'+1}{2j_l+1}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m_\alpha m_\beta M'} \langle j_\mu - m_\mu j_\alpha m_\alpha | j_\mu j_\alpha J' M'\rangle$$

$$\times \langle J' M' j_\beta m_\beta | J' j_\beta j_\lambda m_\lambda\rangle \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta J M\rangle$$

$$= S_{-\mu}\langle j_\lambda m_\lambda j_\mu m_\mu | j_\lambda j_\mu J M\rangle (-1)^{j_a+j_m+J'}$$

$$\times (2J'+1)\begin{Bmatrix} j_m & j_a & J' \\ j_b & j_l & J \end{Bmatrix}, \tag{59.43}$$

得到

$$\sum_{m_\alpha m_\beta M'} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta J M\rangle v_{\alpha\beta;\lambda\mu}$$

$$= v^J_{ab}\langle j_\lambda m_\lambda j_\mu m_\mu | j_\lambda j_\mu J M\rangle, \tag{59.44}$$

这里

$$v^J_{ab;lm} \equiv -\sum_{J'} (2J'+1)\begin{Bmatrix} j_m & j_a & J' \\ j_b & j_l & J \end{Bmatrix} [\langle lbJ' | V | amJ'\rangle$$

$$- (-1)^{j_a+j_m+J'}\langle lbJ' | V | maJ\rangle]. \tag{59.45}$$

式中总的负号来自方程(59.42a)中两个矩阵元的顺序交换，

借助于由方程(59.43)得出的如下恒等式

$$\sum_{m_\alpha m_\beta M'} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta J M\rangle \langle j_\lambda m_\lambda j_\alpha m_\alpha | j_\lambda j_\alpha J' M'\rangle$$

$$\times \langle j_\mu - m_\mu j_\beta - m_\beta | j_\mu j_\beta J' M'\rangle S_{-\beta}$$

$$= S_\lambda \langle j_\mu - m_\mu j_\lambda - m_\lambda | j_\mu j_\lambda J M\rangle$$

$$\times (-1)^{j_a+j_l+J'}(2J'+1)\begin{Bmatrix} j_l & j_a & J' \\ j_b & j_m & J \end{Bmatrix}, \tag{59.46}$$

把 $u_{\alpha\beta;\lambda\mu}$ 乘以方程(59.39 a)中的 Clebsch-Gordan 系数然后求和这一运算可以立即完成. 把周相与方程(59.42 b)中的因子 $S_{-\mu}$ 结合起来，我们有

$$S_\lambda S_{-\mu}(-1)^{j_\alpha+j_\beta+J'} = (-)^{j_\alpha+j_\beta+J'} \times (-1)^{J-M}(-1)^{j_m-j_l-J}.$$

因而所要求的和由下式给出

$$\sum_{m_\alpha m_\beta} \langle j_\alpha m_\alpha j_\beta m_\beta | j_\alpha j_\beta J M \rangle u_{\alpha\beta;\lambda\mu} = u^J_{ab;lm}\langle j_\lambda m_\lambda j_\mu m_\mu | j_\lambda j_\mu J - M \rangle S_J, \quad (59.47)$$

这里

$$u^J_{ab;lm} \equiv (-1)^{j_m-j_l-J} v^J_{ab;ml}. \quad (59.48)$$

注意这个关系式右边的指标 l 和 m 的交换. 重偶合关系式 (59.44) 和 (59.47) 使得有可能把线性方程 (59.22) 改写成

$$\{[E_0 - (\epsilon_a - \epsilon_b)] - E_n\}\psi^{(n)}_J(ab) + \sum_{lm}[v^J_{ab;lm}\psi^{(n)}_J(lm) + u^J_{ab;lm}\varphi^{(n)}_J(lm)] = 0, \quad (59.49a)$$

$$\{[E_0 - (\epsilon_a - \epsilon_b)] - E_n\}\varphi^{(n)}_J(ab) - \sum_{lm}[v^{J*}_{ab;lm}\varphi^{(n)}_J(lm) + u^{J*}_{ab;lm}\psi^{(n)}_J(lm)] = 0. \quad (59.49b)$$

这一计算明显解除了 J 不同的各态之间的耦合，并且证明了本征值和本征矢与 M 无关，置 $\varphi^{(n)} = 0$，可从方程 (59.41) 和 (59.49) 重新得到 Tamm-Dancoff 近似.

直到此刻，方程是完全一般的，适用于原子，也适用于原子核[1]. 但在原子核情况下，相互作用在同位旋空间中的转动不变性，可用来使基进一步约化. 从

$$\{\alpha\} = \left\{nljm_j, \frac{1}{2}m_t\right\}$$

很清楚，我们只需计及同位旋耦合系数和相因子，连同每个角动量耦合系数和相因子. 从方程 (59.41) 立即得到

---

1) 关于原子方面的应用，见 P. L. Altick and A. E. Glassgold, *Phys, Rev.*, **133**: *A* 632 (1964).

$$\langle \Psi^n_{JT} \vdots\vdots \hat{T}_{JT} \vdots\vdots \Psi_0 \rangle$$
$$= \sum_{ab} \{ \langle a \vdots\vdots T_{JT} \vdots\vdots b \rangle \phi^{(n)}_{JT}(ab) + (-1)^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}-T}$$
$$\times (-1)^{j_b - j_a - J} \langle b \vdots\vdots T_{JT} \vdots\vdots a \rangle \varphi^{(n)}_{JT}(ab) \}, \quad (59.50)$$

这里记号$\vdots\vdots$代表相对于角动量和同位旋两者的约化矩阵元. 这一关系式中的系数 $\phi^{(n)}_{JT}$, $\varphi^{(n)}_{JT}$ 满足同样的一组线性方程(59.49), 其中

$$v^{JT}_{ab;lm} = -\sum_{J'T'} (2J'+1)(2T'+1) \begin{Bmatrix} j_m & j_a & J' \\ j_b & j_l & J \end{Bmatrix}$$
$$\times \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T' \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T \end{Bmatrix} \times [\langle lbJ'T' | V | amJ'T' \rangle$$
$$- (-1)^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+T'} (-1)^{j_a + j_m + J'}$$
$$\times \langle lbJ'T' | V | maJ'T' \rangle], \quad (59.51\,a)$$
$$u^{JT}_{ab;lm} = (-1)^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}-T} (-1)^{j_m - j_l - J} v^{JT}_{ab;ml}. \quad (59.51\,b)$$

$\delta(\mathbf{x})$ 型力的[15]维超多重态解

本节将用一种特殊的模型解出 TDA 和 RPA 方程, 在这模型中, 假定粒子间的力与自旋和同位旋无关. 核的基态假定为由闭壳层组成, 并具有量子数 $S = L = T = 0$. 这个模型阐明了粒子-空穴计算的一些很有意义的有规则的特点. Hartree-Fock 单粒子能量, 现在只依赖于 $\{nl\}$, 而单粒子能级可用

$$\{\alpha\} = \left\{ nl \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \; m_l m_s m_t \right\}$$
$$\equiv \{a, m_l m_s m_t\} \quad (59.52)$$

表征, 这是因为力与自旋无关时, m_l 和 m_t 两者都是好的量子数. 上面导出的一般结果是在 j-j 耦合方案中写出的, 这种

耦合方案适合于真实的核，其中单粒子自旋轨道力是重要的．虽然可以显式地变换到适合于简单的自旋无关模型的 L-S 耦合方案，但方便得多的还是从头重复前面的分析，但从稍有不同的正则变换

$$c_\alpha = \theta(\alpha - F)a_\alpha + \theta(F - \alpha)\mathscr{S}_\alpha B^\dagger_{-\alpha} \qquad (59.53)$$

开始，这里[1]

$$\mathscr{S}_\alpha \equiv (-1)^{l_\alpha - m_{l\alpha}}(-1)^{\frac{1}{2}-m_{s\alpha}}(-1)^{\frac{1}{2}-m_{t\alpha}}. \qquad (59.54)$$

用缩写 $\epsilon_n \equiv E_n - E_0$，Tamm-Dancoff 近似中的线性化运动方程现在由方程 (59.9) 给出，

$$(\epsilon_a - \epsilon_b - \epsilon_n)\psi^{(n)}_{\alpha\beta} + \sum_{\lambda\mu}[\langle\lambda - \beta|V| - \mu\alpha\rangle - \langle\lambda - \beta|V|\alpha - \mu\rangle] \times \mathscr{S}_{-\beta}\mathscr{S}_{-\mu}\psi^{(n)}_{\lambda\mu} = 0. \qquad (59.55)$$

由于假定相互作用和单粒子能量为与自旋和同位旋无关，可以通过引入给定 L，S 和 T 的态例如，

$$\psi^{(n)}_{LST}(ab) \equiv \sum_{(\text{所有}m)} \langle l_a m_{l\alpha} l_b m_{l\beta}|l_a l_b\rangle\langle M_L\rangle \times \left\langle \frac{1}{2}\, m_{s\alpha}\ \frac{1}{2}\, m_{s\beta}\ \middle|\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\, S M_S\right\rangle \times \left\langle \frac{1}{2}\, m_{t\alpha}\ \frac{1}{2} m_{s\beta}\middle|\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\, T M_T\right\rangle \psi^{(n)}_{\alpha\beta}, \qquad (59.56)$$

把基加以约化．此外，相互作用矩阵元对自旋和同位旋的依赖关系分解成两个因子[2]．把方程 (59.55) 按方程 (55.56) 中的 Clebsch-Gordan 系数求和时，自旋和同位旋系数可移过相互作用的第二项，而直接作用于波函数．在相互作用的第一项中，对自旋的依赖关系(对同位旋的依赖关系也类似地)，由下式给出

---

1) 注意，如 $j_\alpha = l_\alpha + \frac{1}{2}$，$B^\dagger_\alpha \equiv b^\dagger_\alpha$，而 $j_\alpha = l_\alpha - \frac{1}{2}$，则 $B^\dagger_\alpha = -b^\dagger_\alpha$，因而两个算符只差一个依赖于 a 的周相．

2) 这就是方程(59.53)和(59.54)中的正则变换的优点．

$$\delta_{m_{S\lambda},-m_{S\mu}}\delta_{m_{S\beta},-m_{S\alpha}}(-1)^{\frac{1}{2}-m_{S\alpha}}(-1)^{\frac{1}{2}-m_{S\lambda}}$$
$$=(\sqrt{2})^2\left\langle\frac{1}{2}\,m_{S\alpha}\,\frac{1}{2}m_{S\beta}\middle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,00\right\rangle$$
$$\times\left\langle\frac{1}{2}\,m_{S\lambda}\,\frac{1}{2}m_{S\mu}\middle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,00\right\rangle,$$

这只在 $S=T=0$ 情况才有贡献.

相互作用矩阵元对 l 的依赖关系，完全象上节那样处理. 这样,约化的 TDA 方程成为[比较方程 (59.45)]

$$(\epsilon_a-\epsilon_b-\epsilon_n)\psi^{(n)}_{LST}(ab)+\sum_{lm}v^{LST}_{ab;lm}\psi^{(n)}_{LST}(lm)=0,\quad(59.57\,a)$$

$$v^{LST}_{ab;lm}=-\sum_{L'}(2L'+1)\begin{Bmatrix}l_m & l_l & L\\ l_b & l_a & L'\end{Bmatrix}[\langle l_l l_b L'|V|l_a l_m L'\rangle$$
$$-4\delta_{S0}\delta_{T0}(-1)^{l_b+l_l-L'}\langle l_b l_l L'|V|l_a l_m L'\rangle],\quad(59.57\,b)$$

这里方程 (59.55) 中两个势矩阵元的顺序已经交换. 在这些方程中，指标 (ab) 和 (lm) 又是表示其余的粒子-空穴量子数,例如，$(ab)\equiv(n_a l_a,n_b l_b)$.

方程(59.57) 中的量子数 S 和 T 来自粒子-空穴对的自旋和同位旋的耦合，可取值 0 和 1. 我们将首先集中考虑 S 和 T 不都为零的态；这时，粒子-空穴相互作用 (59.57 b) 特别简单,因为正比于 $\delta_{S0}\delta_{T0}$ 的最后一项为零. 由于其余的相互

表 59.1 [15] 维自旋-同位旋超多重态的简并态

S	T	L	J
1	0	L	$L-1,L,L+1$
0	1	L	L
1	1	L	$L-1,L,L+1$

作用与 S 或 T 无关，我们作出结论：表 59.1 中的 15 个自旋和同位旋态全都具有相同的能量. 这些态因而构成简并的超

多重态（15 维超多重态），并且必须与具有给定 L 的 n 个态结合起来．这个态是通过把方程（59.57 a）中的矩阵元对角化而得到的．在每个（由 L 和 S 的耦合得到的）简并的超多重态中的 J 值也列于表 59.1．由于方程（59.57 b）中的相互作用，对于每个 n 和 L，$S=T=0$ 的单个态显然从其他的态分离开来，本节末将回到这个问题[1]．

假定粒子-粒子相互作用势是短程的且是吸引的（$g>0$）

$$V=-g\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2), \tag{59.58}$$

则问题可以进一步简化．在这种情况下，矩阵元中对 d^3x_2 的积分可以立即求出．此外，恒等式[2]

$$\sum_{m_1m_2}\langle l_1m_1l_2m_2|l_1l_2LM\rangle Y_{l_1m_1}(\Omega)Y_{l_2m_2}(\Omega)$$
$$=(-1)^{l_1-l_2}\left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times\begin{pmatrix}l_1 & l_2 & L\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}Y_{LM}(\Omega)$$

导致如下结果

$$\sum_{m_am_bm_lm_m}\langle l_lm_ll_bm_b|l_ll_bL'M'\rangle\langle l_am_al_mm_m|l_al_mL'M'\rangle$$
$$\times\int Y^*_{l_lm_l}Y^*_{l_bm_b}Y_{l_am_a}Y_{l_mm_m}d\Omega$$
$$=(-1)^{l_l-l_b+l_a-l_m}$$
$$\times\left[\frac{(2l_a+1)(2l_b+1)(2l_l+1)(2l_m+1)}{(4\pi)^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times\begin{pmatrix}l_l & l_b & L'\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}l_a & l_m & L'\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

1）如果力与自旋和同位旋无关，则哈密顿函数在对称群 $SU(4)$ 下不变，这就是 Wigner 超多重态理论 [E. P. Wigner, *Phys. Rev.*, **51**:106(1937)]．于是简并的粒子-空穴态，组成不可约表示 $\mathbf{4}\otimes\bar{\mathbf{4}}=[\mathbf{1}]\oplus[\mathbf{15}]$ 的基．这已在这里的计算中举出明显的例证．

2）A. R. Edmonds, 前引书方程 (4.6.5)

重耦合关系式[1]（注意，如果各 l 的和不为偶数，每一个 3—j 符号都是零）

$$\sum_{L'}(2L'+1)\begin{Bmatrix} l_m & l_l & L \\ l_b & l_a & L' \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} l_l & l_b & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_a & l_m & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$=(-1)^{l_l+L+l_b}\begin{pmatrix} l_a & L & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_l & L & l_m \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

使我们可以把 [15] 维超多重态的粒子-空穴相互作用改写成很简单的形式

$$v^{[15]L}_{ab;lm}=\xi v^L_{ab}v^L_{lm}, \tag{59.59a}$$

$$v^L_{ab}\equiv(-1)^{l_a}[(2l_a+1)(2l_b+1)]^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} l_a & L & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{59.59b}$$

$$v^L_{ao}=\langle l_a\|c_L\|l_b\rangle, \tag{59.59c}$$

这里

$$\xi\equiv\frac{g}{4\pi}\int_0^\infty u_{n_l l}u_{n_b l_b}u_{n_a l_a}u_{n_m l_m}\frac{dr}{r^2}. \tag{59.60}$$

在这个表式中，u_{nl}/r 是径向波函数[参阅，例如，方程(57.6)]. 注意 v^L_{ab} 正是球谐函数 $c_{LM}=[4\pi/(2L+1)]^{\frac{1}{2}}Y_{LM}$ 的约化矩阵元. 对于最初几个未被占据的壳层上的粒子和最后几个被填充的壳层上的空穴，径向波函数在原子核表面上有峰值，而从一个粒子-空穴对变到下一个粒子-空穴对时，重迭积分 ξ 并没有明显的变化[2]. 因此，我们将假定 ξ 是一个与态无关的正的常数. 在这种情况下，粒子-空穴相互作用是可分离的. 所得的 TDA 方程(这里 $\varepsilon_{ab}=\varepsilon_a-\varepsilon_b$)

$$(\varepsilon_{ab}-\varepsilon_n)\phi^{(n)}_{[15]L}(ab)+\xi v^L_{ao}\left[\sum_{lm}v^L_{lm}\phi^{(n)}_{[15]L}(lm)\right]=0 \tag{59.61}$$

---

1) A. R. Edmonds, 前引书，方程(6.2.6).

2) 关于这些矩阵元的显式计算，参阅 H. Noya, A. Arima and H. Horie, *Suppl. Prog. Theor. Phys. (Kyoto)*, **8**: 33 (1959), Table 2. 事实上，它们引人注目地是常数.

于是可乘以 $v^L_{ab}/(\varepsilon_{ab}-\varepsilon_n)$ 并对 ab 求和以给出本征值方程

$$\frac{1}{\xi}=\sum_{ab}\frac{(v^L_{ab})^2}{\varepsilon_n-\varepsilon_{ab}}. \tag{59.62}$$

对于给定的 L,这一方程的解示于图59.1.如果包括 n 个粒子-空穴态，则本征值中的 $n-1$ 个处于相邻的未微扰能量 ε_{ab} 之间，有一个本征值 $\varepsilon_{顶}$ 则被向上推到一个任意的高能量,其值取决于量 $1/\xi$.

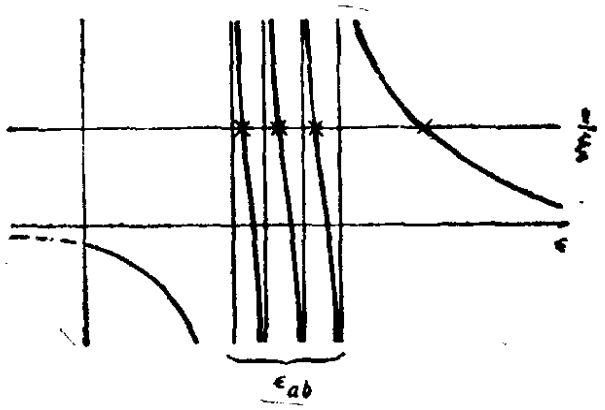


图 59.1 $\sum_{ab}(v^L_{ab})^2(\varepsilon-\varepsilon_{ab})^{-1}$ 作为 ε 的函数的曲线，方程 (59.62) 的本征值 ε_n 由叉号表示.

为了进一步研究这些态,我们作简化假定：所有的粒子-空穴态起初是简并的,即

$$\varepsilon_{ab}=\varepsilon_a-\varepsilon_b\equiv\varepsilon_0.$$

在这种情况下，最高的超多重态的能量成为

$$\varepsilon_{顶}=\varepsilon_0+\xi\sum_{ab}(v^L_{ab})^2, \tag{59.63}$$

而方程 (59.61) 表明,对于这些态，$\psi^{顶}_{[15]}(ab)\propto v^L_{ab}$. 因而归一化波函数是

$$\psi^{顶}_{[15]L}(ab)=\frac{v^L_{ab}}{\left[\sum_{ab}(v^L_{ab})^2\right]^{\frac{1}{2}}}. \tag{59.64}$$

对于另外 $n-1$ 个本征值，图 59.1 表明

$$\varepsilon_n-\varepsilon_0=0\quad(另外\ n-1\ 个本征值), \tag{59.65}$$

因而对这些超多重态中的每一个，

$$\sum_{lm} v^L_{lm}\phi^{(n)}_{[15]L}(lm) = 0$$

（另外 $n-1$ 个超多重态）。 (59.66)

我们可以利用这些结果来计算电荷密度分布的各种多极子在 $T=S=L=0$ 的基态和这激些发模之间的矩阵元，

$$Q_{LM} \equiv \sum_{j=1}^{A} r_j^L c_{LM}(\Omega_j)\frac{1}{2}[1+\tau_3(j)], \quad (59.67)$$

由方程 (59.14)，一般的不可约张量矩阵元由下式给出

$$\langle \Psi_n|\hat{T}|\Psi_0\rangle = \sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|T|-\beta\rangle\mathscr{S}_{-\beta}\phi^{(n)}_{\alpha\beta}. \quad (59.68)$$

自旋矩阵元分解为因式，因为 Q_{LM} 是自旋无关的，而对 m_S 求和

$$\sum_{m_{S\alpha}m_{S\beta}} \delta_{m_{S\alpha},-m_{S\beta}}(-1)^{\frac{1}{2}+m_{S\beta}}\phi^{(n)m_{S\alpha}m_{S\beta}} = \sqrt{2}\,\phi^{(n)}_{S=0}$$

消去了除 $S=0$ 的激发态以外的一切态．在 [15] 超多重态中，$S=0$ 的激发态必定具有 $T=1$ (参阅表 59.1)，只有方程 (59.67) 中的 τ_3 项对跃迁矩阵元作出贡献．由于

$$\left\langle\frac{1}{2}\left\|\frac{1}{2}\boldsymbol{\tau}\right\|\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{6},$$

从而得到 [比较方程 (59.50)]

$$\langle \Psi^n_{[15]L}:::\hat{Q}_L:::\Psi_0\rangle = \sqrt{3}\,\delta_{S0}\sum_{ab}\langle l_a\|c_L\|l_b\rangle \times \phi^{(n)}_{[15]L}(ab)\langle r^L\rangle_{ab}. \quad (59.69)$$

如果再假定径向矩阵元与态 (ab) 无关，则约化矩阵元可简化为

$$\langle \Psi^n_{[15]L}:::\hat{Q}_L:::\Psi_0\rangle = \sqrt{3}\,\delta_{S0}\langle r^L\rangle\left[\sum_{ab} v^L_{ab}\phi^{(n)}_{[15]L}(ab)\right]. \quad (59.70)$$

在初始粒子-空穴态为简并的特例中，这个表式成为 [参阅方

程 (59.64) 和 (59.66)]

$$\langle \Psi^{\mathrm{top}}_{[15]L} \vdots\vdots \hat{Q}_L \vdots\vdots \Psi_0 \rangle = \sqrt{3}\,\delta_{S0}\langle r^L\rangle \Big[\sum_{ab} (v^L_{ab})^2\Big]^{\frac{1}{2}}, \quad (59.71\,\mathrm{a})$$

$$\langle \Psi^{n}_{[15]L} \vdots\vdots \hat{Q}_L \vdots\vdots \Psi_0 \rangle = 0 \quad (\text{其余 } n-1 \text{ 个超多重态}). \quad (59.71\mathrm{b})$$

对于每个 L，我们求得如下值得注意的结果. 能量被推上去的那一个超多重态带有全部的跃迁强度，至于另外 $n-1$ 个简并的超多重态则根本没有任何跃迁强度.

实验事实表明：原子核的低能光电吸收主要是巨共振. 这个态的宽度为几个兆电子伏，其激发能有规律地降低，从最轻的核中的大约 25 兆电子伏，减少到最重的核中的 10 个兆电子伏. 对于这种能量的光子，起主要作用的多极子是电偶极子，而巨共振也就系统地穷尽了偶极求和定则(参阅习题 15.17). 电偶极算符是[1]

$$Q_{LM} = \sum_{j=1}^{4} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} x_{lm}\,\frac{1}{2}\,\tau_3(j).$$

这样，激发态必须具有 $S=0$，$T=1$ 和 $L^\pi = J^\pi = 1^-$，如果基态具有 $S=T=0$ 和 $L^\pi = J^\pi = 0^+$.

巨偶极共振的最简单的图象是 Goldhaber 和 Teller[2]，得出的，这个图象是，质子相对于中子而振动. 这里提出的一个较为精致的模型原来是 Brown 和 Bolsterli[3] 建议的. 观察到的巨偶极共振可以认为是顶高为 $L=1$ 超多重态的 $T=1$，$S=0$ 态，它确实展示了这一模型的许多特点. 出

---

1) 注意对于电偶极算符，方程 (59.67) 中的第一项(同位旋标量项)正比于 $\sum_{j=1}^{A} \mathbf{x}(j)$，这正是质心的位置. 因而这一项不会引起系统的内激发.

2) M. Goldhaber and E. Teller, *Phys, Rev.*, **74**: 1046 (1948).

3) G. E. Brown and M. Bolsterli, *Phys, Rev. Letters*, **3**: 472 (1959). (这些作者原来关心的是 $T=0$，$J^\pi = 0^+$ 原子核的 $T=1$，$J^\pi = 1^-$激发态)，也可参阅 G. E Brown, 前引书 p.29.

现巨偶极共振的能量，高于由相邻核得到的未微扰组态能量 ϵ_{ab}，并且它带有全部偶极跃迁强度.

对于 $L=1$ 的情形，这里的简要的模型预言了这些巨共振态的一个超多重态. 这模型还预言了另外一些巨共振超多重态，对于每个可容许的 L，各有一个超多重态. He^4 是在 $1s$ 振子壳层上有四个核子的最简单的闭壳层的核，在 He^4 中，可以期望最低的几个负宇称激发态属于 $L=1$ 的 $(1p)(1s)^{-1}$ 粒子-空穴组态. 在这一组态的基础上建立的 [15] 超多重态的一切态，都已在实验上验明[1]. 此外，从非弹性电子散射还得到证据表明，在 C^{12} 和 O^{16} 两者之中存在着巨共振的，$L=1$ 的 [15] 超多重态的 $T=1$，$S=1$，$J^\pi=1^-$ 和 2^- 分量[2].

在考虑 $S=0$，$T=0$ 的激发态以前，我们先在 RPA 框架内再研究这些 [15] 超多重态. 线性化方程由方程 (59.22) 和 (59.23) 给出，而通过引入具有确定 T，S 和 L 的态，又可以将基约化. 正象前面那样，如果 S 和 T 不都为零；则方程 (59.21) 中的第一项没有贡献；并且自旋和同位旋的 Clebsch-Gordan 系数可以移过第二个相互作用项，而作用于波函数上. 矩阵元的 l 部分的约化，完全像前面的讨论中那样进行. 这样，[15] 超多重态中的相互作用成为[比较方程 (59.48)]

$$v_{ab;lm}^{[15]L}=\xi v_{ab}^{L}v_{lm}^{L}, \tag{59.72 a}$$

$$\begin{aligned} v_{ab;lm}^{[15]L} &= \xi v_{ab;ml}^{[15]L}(-1)^{l_m-l_l-L}(-1)^{S+T} \\ &= (-1)^{L+S+T}\xi v_{ab}^{L}v_{lm}^{L}. \end{aligned} \tag{59.72 b}$$

由于假定 ξ 是常数，势又是可分离的，RPA 方程可以写成[3]

---

1) W. E. Meyerhof and T. A. Tombrello, *Nucl. Phys.*, **A109**:1(1968).

2) T. deForest and J. D. Walecka, Electron Scattering and Nuclear Structure, in *Advan. Phys.*, **15**: 1 (1966).

3) 通过对振幅 ψ 和 $(-1)^{L+S+T}\varphi$ 的考虑，可以消去周相对 S 和 T 的依赖关系，这些振幅决定一些有意义的物理量 [方程 (59.74) 和 (59.78)].

$$(\varepsilon_{ab}-\varepsilon_n)\psi^{(n)}_{[15]L}(ab)+\xi v^L_{ab}$$
$$\times\left\{\sum_{lm}[v^L_{lm}\psi^{(n)}_{[15]L}(lm)+(-1)^{L+S+T}v^L_{lm}\varphi^{(n)}_{[15]L}(lm)]\right\}$$
$$=0, \tag{59.73 a}$$
$$(\varepsilon_{ab}+\varepsilon_n)\varphi^{(n)}_{[15]L}(ab)+\xi v^L_{ab}$$
$$\times\left\{\sum_{lm}[v^L_{lm}\varphi^{(n)}_{[15]}(lm)+(-1)^{L+S+T}v^L_{lm}\psi^{(n)}_{[15]L}(lm)]\right\}$$
$$=0. \tag{59.73 b}$$

乘以 $v^L_{ab}/(\varepsilon_{ab}\mp\varepsilon_n)$ 并对 (ab) 求和，得出本征值方程

$$\frac{1}{\xi}=\sum_{ab}(v^L_{ab})^2\left(\frac{1}{\varepsilon_n-\varepsilon_{ab}}-\frac{1}{\varepsilon_n+\varepsilon_{ab}}\right). \tag{59.74}$$

这一方程明显对 ε_n 对称，而激发能是 ε_n 为正值时的解（如图 59.2 所示）. 正像在 TDA 中那样，$n-1$ 个本征值陷于相邻

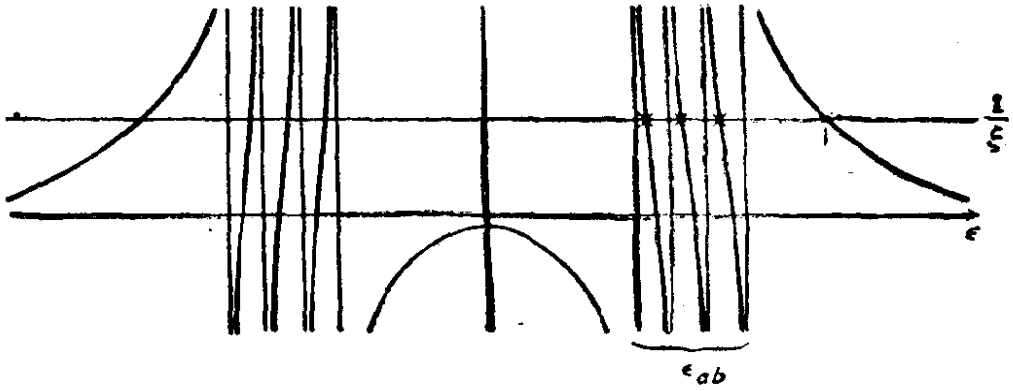


图 59.2 $\sum_{ab}(v^L_{ab})^2[(\varepsilon-\varepsilon_{ab})^{-1}-(\varepsilon+\varepsilon_{ab})^{-1}]$ 作为 ε 的函数的曲线，正的本征值 ε_n 由叉号表示.

的值 ε_{ab} 之间，一个则被推了上去，尽管不像在 TDA 中那样远.

在简并情形下，$\varepsilon_{ab}=\varepsilon_0$，正 ε_n 的解又大大地简化. 最高的本征值由下式给出

$$\varepsilon_{top}=\varepsilon_0\left[1+\frac{2\xi}{\varepsilon_0}\sum_{ab}(v^L_{ab})^2\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{59.75}$$

对于这个超多重态，由 RPA 方程得到 ψ_{ab} 和 φ_{ab} 两者都正比于 v_{ab}^{L}，而 $\psi_{ab}/\varphi_{ab}=(-1)^{L+S+T}(\varepsilon_0+\varepsilon)/(\varepsilon_0-\varepsilon)$. 利用方程 (59.24) 的归一化，波函数成为

$$\varphi_{[15]L}^{\mathrm{top}}(ab)=(-1)^{L+S+T}\frac{v_{ab}^{L}}{\left[\sum_{ab}(v_{ab}^{L})^{2}\right]^{1/2}}\left[\frac{\varepsilon_0-\varepsilon_{\mathrm{top}}}{2(\varepsilon_{\mathrm{top}}\varepsilon_0)^{1/2}}\right], \tag{59.76 a}$$

$$\psi_{[15]L}^{\mathrm{top}}(ab)=\frac{v_{ab}^{L}}{\left[\sum_{ab}(v_{ab}^{L})^{2}\right]^{1/2}}\left[\frac{\varepsilon_0+\varepsilon_{\mathrm{top}}}{2(\varepsilon_{\mathrm{top}}\varepsilon_0)^{1/2}}\right]. \tag{59.76 b}$$

其余 $n-1$ 个本征值保持不变，并由此得出：

$$\left.\begin{aligned}&\varepsilon_n=\varepsilon_0 && (59.77\ \mathrm{a})\\ &\varphi_{[15]L}^{(n)}(ab)=0, && (59.77\ \mathrm{b})\\ &\sum_{ab}v_{ab}^{L}\psi_{[15]L}^{(n)}(ab)=0 && (59.77\ \mathrm{c})\end{aligned}\right\}\text{(其余 } n-1 \text{ 个超多重态)}$$

从基态出发的多极子跃迁矩阵元，可从方程 (59.35) 得出，其中 $S_{-\beta}$ 用 $\mathscr{S}_{-\beta}$ 代替. 对于方程(59.67)的电荷多极子，这又是只有 $S=0$，$T=1$ 的激发态作出贡献，我们得到[比较方程 (59.50)]

$$\langle\Psi_{[15]L}^{n}\vdots\vdots\hat{Q}_L\vdots\vdots\Psi_0\rangle=\sqrt{3}\ \delta_{S0}\sum_{ab}\langle r\rangle_{ab}[v_{ab}^{L}\psi_{[15]L}^{(n)}(ab)+(-1)^{L+S+T}v_{ab}^{L}\varphi_{[15]L}^{(n)}(ab)]. \tag{59.78}$$

在简并未微扰组态能量以及径向矩阵元与 (ab) 无关的情况下，这一表示式成为

$$\left\{\begin{aligned}&\langle\Psi_{[15]L}^{\mathrm{top}}\vdots\vdots\hat{Q}_L\vdots\vdots\Psi_0\rangle=\sqrt{3}\,\delta_{S0}\langle r^{L}\rangle\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{\mathrm{top}}}\right)^{\frac{1}{2}}\\ &\qquad\qquad\times\left[\sum_{ab}(v_{ab}^{L})^{2}\right]^{\frac{1}{2}}, && (59.79)\\ &\langle\Psi_{[15]L}^{n}\vdots\vdots\hat{Q}_L\vdots\vdots\Psi_0\rangle=0\\ &\text{(其余 } n-1 \text{ 个超多重态).}\end{aligned}\right.$$

因而跃迁几率从相应的态的 TDA 减小了一个因子$(\epsilon_0/\epsilon)^{\frac{1}{2}}$. 这代表一种改进，因为，单一粒子-空穴 TDA 计算给出的顶高超多重态的强度往往过大[1].

最后，回到 $T=0$，$S=0$ 态（[1] 超多重态），在这些态上，粒子-空穴相互作用还有另外的项. 由方程 (59.57 b) 和导致方程 (59.59 a) 的计算显然可以看到，对于 δ 函数势，粒子-空穴相互作用又是可分离的. 事实上，有关矩阵元由下式给出

$$v^{[1]}_{ab;lm} = -3\,v^{[15]}_{ab;lm}, \tag{59.80 a}$$

$$u^{[1]}_{ab;lm} = -3u^{[15]}_{ab;lm}. \tag{59.80 b}$$

因而这些矩阵元在 $S=T=0$ 的态变号. 所有的计算完全像以前那样进行[2]，但用了一个新的 ξ'，它是负的，$\xi' = -3\xi$. 从图 59.1 和 59.2 可知，集体能级的能量被推向下，而且在 RPA 中比在 TDA 中推得更远. 此外，在 RPA 中，由于 $(\epsilon_0/\epsilon)^{\frac{1}{2}} > 1$，$S=T=0$ 的集体态，向基态跃迁的矩阵元较大，从而变得比在 TDA 中更为集体化[3]. RPA 的这两个特点使得与实验的比较一般有所改善.

对核的应用：O^{16}

为了举例说明这个理论对真实物理系统的应用，我们总结一下在 TDA 中关于 O^{16} 的 $T=1$ 的负宇称态的计算[4]. 在

1) 可以证明，RPA 保存了某些以能量为权重的带权求和定则；参阅习题 15.16.

2) 对 [1] 超多重态，只有电荷多极矩的同位旋标量部分对跃迁有贡献，而方程(59.69)到(59.71)和(59.78)以及(59.79)的右边必须乘以 $1/\sqrt{3}$

3) 关于这些方面的例证，参阅 V. Gillet and M. A. Melkanoff, *Phys. Rev.* **133**: B1190 (1964).

4) 首先对 O^{16} 进行这一类型的计算的是 J. P. Elliott and R. H. Flowers, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A 242**: 57 (1957) 和 G. E. Brown, L. Castillejo, and J. A. Evans, *Nucl. Phys.*, **22**: 1 (1961). 这里的计算引自 T. W. Donnelly and G. E. Walker, *Ann. Phys. (N. Y.)*

核中，自旋轨道力相对说来是强的，这使得回到用 (nlj) 标记的单粒子态是适当的．假定 O^{16} 的基态构成闭合的 p 壳层，而且保留所有那些负宇称组态，这些组态是把粒子从 $1p$ 振子壳层提高到靠近的 $2s$-$1d$ 振子壳层而得到的（见图 57.3）．所得的粒子-空穴态和 J^π 的可能值一起列在表 59.2 中．表 59.2 也给出了这样一些态的 Hartree-Fock 组态能量 $\epsilon_a-\epsilon_b$［见方程 (56.22) 到 (56.24)］，这些态是从相邻的原子核加上额外的中子粒子（或空穴）而得的．

表 59.2　O^{16} 的负宇称粒子-空穴组态

组　　态	$\epsilon_a-\epsilon_b$（兆电子伏）	态
$(2s_{1/2})(1p_{3/2})^{-1}$	18.55	$1^-,2^-$
$(1d_{5/2})(1p_{3/2})^{-1}$	17.68	$1^-,2^-,3^-,4^-$
$(1d_{3/2})(1p_{3/2})^{-1}$	22.76	$0^-,1^-,2^-,3^-$,
$(2s_{1/2})(1p_{1/2})^{-1}$	12.39	$0^-,1^-$
$(1d_{5/2})(1p_{1/2})^{-1}$	11.52	$2^-,3^-$
$(1d_{3/2})(1p_{1/2})^{-1}$	16.60	$1^-,2^-$

来源：T. W. Donnelly and G. E. Walker, *Ann. Phys.* (N. Y.).

粒子-空穴相互作用由方程 (59.51 a) 算出．在这个计算过程中，核子-核子势取作具有 Serber 交换的非奇异 Yukawa 形式，并使它与低能核子-核子散射相拟合：

$$\begin{cases} V(1,2)=[{}^1V(r_{12}){}^1P+{}^3V(r_{12}){}^3P]\dfrac{1}{2}[1+P_M(1,2)], \\ {}^1P=\dfrac{1}{4}(1-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2),\ {}^3P=\dfrac{1}{4}(3+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2), \\ V(r_{12})=V_0\dfrac{e^{-\mu r_{12}}}{\mu r_{12}}, \\ {}^1V_0=-46.87\text{ 兆电子伏},\quad {}^1\mu=0.8547\text{ 费米}^{-1}, \\ {}^3V_0=-52.13\text{ 兆电子伏},\quad {}^3\mu=0.7261\text{ 费米}^{-1}. \end{cases} \tag{59.81}$$

在计算矩阵元中，用方程 (57.6) 中的谐振子波函数作为近似

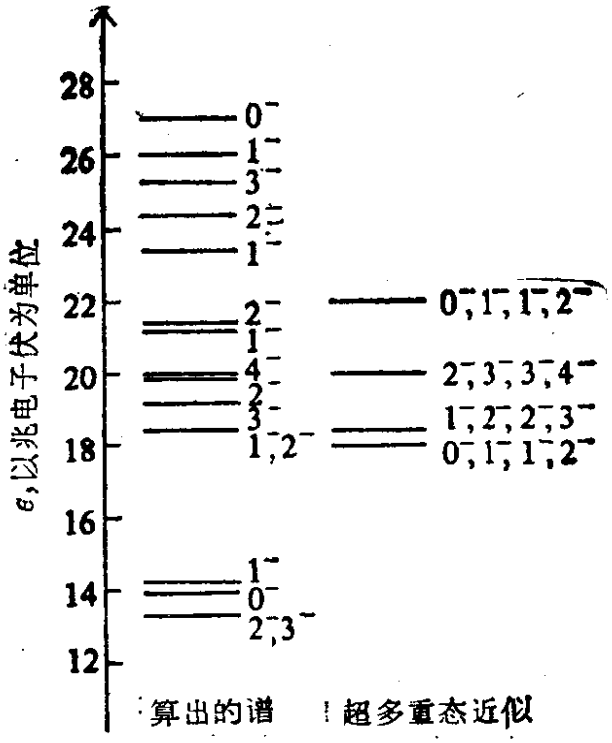


图 59.3　像正文所描述的那样算出来的 O^{15} 的 $T=1$ 谱．撤去与自旋有关的力而得到的超多重态结构也示于图中

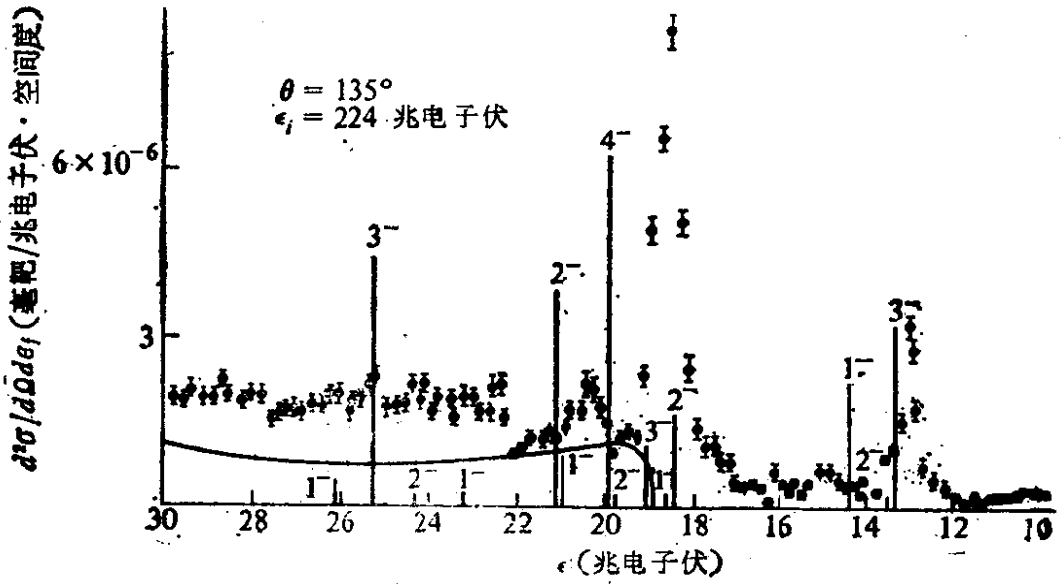


图 59.4　入射能量为 $\epsilon_i = 224$ 兆电子伏的电子在 $\theta = 135°$ 的非弹性散射的实验谱．作为核激发能 ϵ 的函数．用图 59.3 中的态算出的谱也示于图中(采用任意的总的归一化；各线丛的积分面积近似地与理论相符，相差不超过因子 2)．实线是核子发射阈值以上的非共振背景的计算结果．[引自 I. Sick, E. B. Hughes, T. W. Donnelly, J. D. Walecka, and G. E. Walker, *Phys. Rev. Letters*, **23**: 1117 (1969) and T. W. Donnelly and G. E. Walker, *Ann. Phys.* (*N.Y.*)]

的 Hartree-Fock 波函数，振子参数 $b = 1.77 \times 10^{-13}$ 厘米是按弹性电子散射拟合而定出来的．算出的谱示于图 59.3．通过例如由非弹性电子散射所激发的跃迁，可以看到这些集体态，图 59.4 把实验谱与预测的峰的位置和相对强度进行比较．跃迁矩阵元是利用从 TDA 计算得到的系数 $\phi^n_{JT}(ab)$ 来计算的［见方程 (59.50)］．算出的峰的位置一律偏高大约 1 兆电子伏；此外，实验的能级在粒子发射阈值以上十分宽(在现在的情况下≈19 兆电子伏)，因而，使用简单的束缚态是不适当的．尽管如此，一般符合情况还是很好的．

依照前面的模型计算方法，我们还要研究这些态的超多重结构．适当的粒子-空穴组态 $(n_a l_a)(n_b l_b)^{-1}$ 是 $(2s)(1p)^{-1}$ 和 $(1d)(1p)^{-1}$，$L=1$ (出现两次)，2 和 3．只有对于自旋无关力，超多重态才是简并的．为了揭示这种结构，我们先假定观察到的 (nlj) 态是按照方程 (57.14) 到 (57.16) 从原来的组态 (nl) 移动过来的，这样就"关闭"了单粒子自旋轨道力；然后，我们只保留方程 (59.81) 的相互作用的自旋无关部分．所得的［15］超多重态的 $T = 1$ 的成员示于图 59.3．显然，超多重态近似只是定性地描述了真正的谱．

60. 激发态：Green 函数方法[1)]

在本节中，我们再次研究有限的相互作用系集的集体激发，但现在应用量子场论这个较为一般而有力的工具．

---

1) 本节的处理主要基于 D. J. Thouless, *Rep. Prog. Phys.* **27**:53 (1964)．也可参阅 W. Czyz, *Acta Phys. Polon.*, **20**: 737 (1961) 和 G. E. Brown, Course XXIII-Nuclear Physics in "Proc. Int. School of Physics 'Enrico Fermi', p.99, Academic Press, New York, 1963.

极化传播函数

如第 13 节所讨论的，系统对如下形式的微扰

$$\hat{H}^{ex}(t) = \int \hat{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}) V^{ex}(\mathbf{x}t) \hat{\phi}(\mathbf{x}) d^3x \qquad (60.1)$$

的响应，是由密度相关函数或极化传播函数控制的．在这里关于有限系统的讨论中，极化传播函数的定义为[1]

$$i\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(t-t') \equiv \langle \Psi_0 | T[c^{\dagger}_{H\mu}(t) c_{H\lambda}(t) c^{\dagger}_{H\alpha}(t') c_{H\beta}(t')] | \Psi_0 \rangle \qquad (60.2)$$

其中 $|\Psi_0\rangle$ 是方程 (56.18) 中的哈密顿函数的严格的 (归一化的) Heisenberg 基态．希腊字母下标指的是单粒子 Hartree-Fock 态，而 $c_{H\alpha}(t)$ 和 $c^{\dagger}_{H\alpha}(t)$ 是 Heisenberg 算符，由如下关系

$$c_\alpha \equiv \theta(\alpha - F) a_\alpha + \theta(F - \alpha) S_\alpha b^{\dagger}_{-\alpha} \qquad (60.3)$$

与粒子和空穴算符相联系．就像第59节那样，我们还是只考虑闭壳层基态．

$\Pi(t-t')$ 的一般图解结构如图 60.1．在时间 t' 产生了一个处于 $(\alpha\beta)$ 态的粒子-空穴对．然后，它传播到时间 t，在 (λ_μ) 态被破坏．注意，方程 (60.2) 的定义正是下式所定义的系集的完全极化传播函数的一部分，

$$i\Pi(x,x') = \langle \Psi_0 | T[\hat{\phi}^{\dagger}(x)\hat{\phi}(x)\hat{\phi}^{\dagger}(x')\hat{\phi}(x')] | \Psi_0 \rangle, \qquad (60.4\,a)$$

$$i\Pi(x,x') = \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} \varphi_\mu(\mathbf{x})^{\dagger} \varphi_\lambda(\mathbf{x}) \varphi_\alpha(\mathbf{x}')^{\dagger} \varphi_\beta(\mathbf{x}') i\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(t-t'), \qquad (60.4\,b)$$

这里 $\{\varphi\}$ 表示 Hartree-Fock 波函数 [方程 (56.17)]．用第三章的方法容易证明 $\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}$ 是 $t-t'$ 的函数，并因而取如下形式

---

1) 注意这里 Π 的指标的次序与方程 (9.34) 中的稍有不同(比较图 9.18 和 60.1)．这里的选择对粒子-空穴相互作用的研究较为方便，并使我们能够以特别清楚的形式写出一些重要方程[例如(60.20)]．

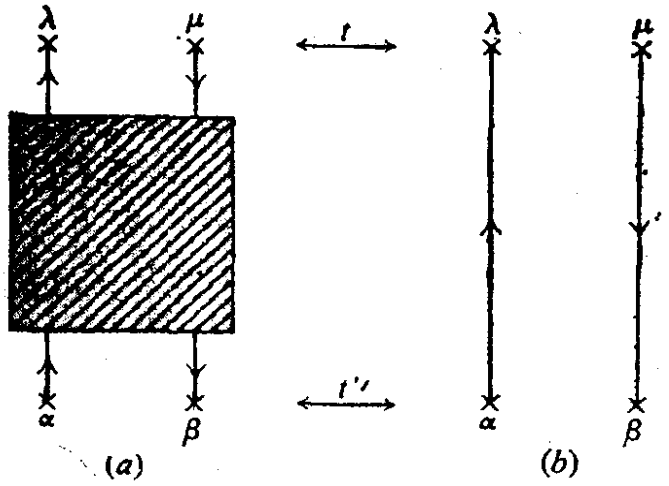


图 60.1　对方程 (60.2) 中的 $\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(t-t')$ 有贡献的费曼图解的结构 (*a*) 一般的，(*b*) 最低级的.

$$\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(t-t')=(2\pi)^{-1}\int d\omega\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}. \quad (60.5)$$

此外，Lehmann 表示可象第 7 节中那样导出:

$$\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega)=\hbar\sum\left[\frac{\langle\Psi_0|c_\mu^\dagger c_\lambda|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|c_\alpha^\dagger c_\beta|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-(E_n-E_0)+i\eta}\right.$$
$$\left.-\frac{\langle\Psi_0|c_\alpha^\dagger c_\beta|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|c_\mu^\dagger c_\lambda|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega+(E_n-E_0)-i\eta}\right]. \quad (60.6)$$

注意，中间态 $|\Psi_n\rangle$ 属于正好有 N 个粒子的系集. 显然，极化传播函数的极点决定了由方程(60.1) 形式的微扰可达到的激发态的能量.

为了用费曼图解把 Π 表示出来，我们先转到相互作用表象，并写出

$$i\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(t-t')$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i/\hbar)^n}{n!}\int dt_1\cdots dt_n\langle 0|T[\hat{H}_2(t_1)\cdots\hat{H}_2(t_n)$$
$$\times c_\mu^\dagger(t)c_\lambda(t)c_\alpha^\dagger(t')c_\beta(t')]|0\rangle_{\text{连接}}, \quad (60.7)$$

这里 $\hat{H}_2$ 是方程 (56.21) 中的相互作用. 态 $|0\rangle$ 是图 56.1 所示的 Hartree-Fock 真空，即基态. 用 Wick 定理对这一表示

式进行分析，在给定的 $\hat{H}_2$ 内部没有收缩，因为 $\hat{H}_2$ 已经是正规编序的. 这样，这里的理论没有图 10.1 所示的那种类型的 Fegnman 图解;所有这些项都用第 56 节的正则变换求出了和. 极化传播函数 [方程 (60.7)] 仍然包含图 60.2 所示那种结构的不连接图形. 然而，这样的项与 $t-t'$ 无关，只对 $\Pi(\omega)$ 的 $\omega=0$ 分量有贡献. 因为这里限于考虑 $\omega\neq 0$ 的分量，所以将把它们完全略去. 或者，换一种方式，我们可以考虑用涨落密度

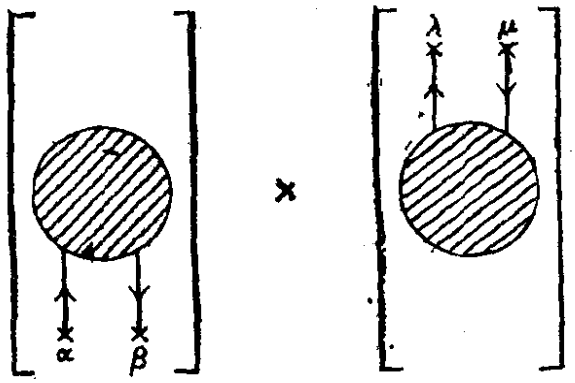


图 60.2 对方程 (60.7) 有贡献的不连接图形. 它们只是在 $\omega=0$ 有贡献，因而在下面的分析中略去.

$$\delta[c^{\dagger}_{H\alpha}(t')c_{H\beta}(t')]\equiv c^{\dagger}_{H\alpha}(t')c_{H\beta}(t')-\langle\Psi_0|c^{\dagger}_{H\alpha}(t')c_{H\beta}(t')|\Psi_0\rangle \quad (60.8)$$

定义的极化传播函数，像第 12 节和第 32 节所做的那样. 最后一项是 c 数，不会引起跃迁;它的作用只是消除方程 (60.6)中的 $n=0$ 项，因而修订的 $\Pi(\omega)$ 在 $\omega=0$ 处没有奇点. 在坐标空间中相应的 c 数项正好抵消图 60.2 所示类型的 Feynman 图解.

自由单粒子传播函数由下式定义

$$\langle 0|T[c_\lambda(t)c^{\dagger}_\alpha(t')]|0\rangle\equiv iG^0_{\lambda\alpha}(t-t') \quad (60.9)$$

$$\langle 0|T[c_\lambda(t)c^{\dagger}_\alpha(t')]|0\rangle\equiv(2\pi)^{-1}\int d\omega iG^0_{\lambda\alpha}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}, \quad (60.10)$$

这里的 c 都是相互作用表象中的. 用大家熟悉的计算可导至

$$G^0_{\lambda\alpha}(\omega) = \delta_{\lambda\alpha}\left[\frac{\theta(\alpha - F)}{\omega - \omega_\alpha + i\eta} + \frac{\theta(F - \alpha)}{\omega - \omega_\alpha - i\eta}\right]. \quad (60.11)$$

对 Π 的一个最低级贡献示于图 60.1 b，在坐标空间中，应用 Wick 定理给出

$$i\Pi^0_{\lambda\mu;\alpha\beta}(t - t') = -(2\pi)^{-2}\int d\omega_1 \int d\omega_2 i G^0_{\lambda\alpha}(\omega_1) i G^0_{\beta\mu}(\omega_2) \times e^{-i\omega_1(t-t')} e^{i\omega_2(t-t')}, \quad (60.12)$$

而在动量空间中给出

$$i\Pi^0_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = -(2\pi)^{-2}\int d\omega_1 \int d\omega_2 2\pi\delta(\omega - \omega_1 + \omega_2) \times i G^0_{\lambda\alpha}(\omega_1) i G^0_{\beta\mu}(\omega_2), \quad (60.13\,a)$$

$$i\Pi^0_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = -i^2(2\pi)^{-1}\int d\omega_1 G^0_{\lambda\alpha}(\omega_1) G^0_{\beta\mu}(\omega_1 - \omega), \quad (60.13\,b)$$

$$i\Pi^0_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = i\delta_{\lambda\alpha}\delta_{\beta\mu}\left[\frac{\theta(\alpha - F)\theta(F - \beta)}{\omega - (\omega_\alpha - \omega_\beta) + i\eta} - \frac{\theta(F - \alpha)\theta(\beta - F)}{\omega + (\omega_\beta - \omega_\alpha) - i\eta}\right]. \quad (60.13\,c)$$

现在有可能导出对极化传播函数的第一级改正. 相互作用哈密顿函数是

$$\hat{H}_2(t - t') = \frac{1}{2}\sum_{\rho\sigma\eta\nu}\langle\rho\sigma|V|\eta\nu\rangle \times N[c^\dagger_\rho(t)c^\dagger_\sigma(t')c_\nu(t')c_\eta(t)]\delta(t - t'), \quad (60.14)$$

而 δ 函数可写成

$$\delta(t - t') = (2\pi)^{-1}\int d\omega e^{i\omega(t-t')}.$$

因此我们求得

$$i\Pi^{(1)}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(t - t') = -i\hbar^{-1}\iint dt_1 dt'_1 \frac{1}{2}\sum_{\eta\nu\rho\sigma}\langle\rho\sigma|V|\eta\nu\rangle \times \int (2\pi)^{-1} \times \exp[i\omega_5(t_1 - t'_1)]d\omega_5$$

$$\times \langle 0|T\{N[c_\rho^\dagger(t_1)c_\sigma^\dagger(t_1')c_\nu(t_1')c_\eta(t_1)]$$
$$\times c_\mu^\dagger(t)c_\lambda(t)c_\alpha^\dagger(t')c_\beta(t')\}|0\rangle. \qquad (60.15)$$

用 Wick 定理分析这个式子，可看到存在着两组贡献，它们的差别仅仅在于傀变量的交换 $\rho \rightleftharpoons \sigma$，$\eta \rightleftharpoons \nu$ 和 $t \rightleftharpoons t_1'$。我们可以只保留第一组从而约掉总的因子 1/2. 在每个顶点的频率守恒意味着，变量 $t - t'$ 总是出现在因子 $e^{-i(\omega_1-\omega_2)(t-t')}$ 中，像在方程 (60.12) 中那样. 这样，在 Fourier 变换中必定包括因子 $2\pi\delta(\omega - \omega_1 + \omega_2)$ 而给出端点的解释[比较方程 (60.13 a)]. 这些结果给出

$$i\Pi^{(1)}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = \frac{-i}{\hbar}\sum_{\eta\nu\rho\sigma}\langle\rho\sigma|V|\eta\nu\rangle\int\frac{d\omega_1}{2\pi}\cdots\int\frac{d\omega_5}{2\pi}$$
$$\times\{-iG^0_{\eta\alpha}(\omega_1)iG^0_{\lambda\rho}(\omega_3)iG^0_{\nu\mu}(\omega_4)$$
$$\times iG^0_{\beta\sigma}(\omega_2)2\pi\delta(\omega_1-\omega_3-\omega_5)$$
$$\times 2\pi\delta(\omega_4+\omega_5-\omega_2)$$
$$+ iG^0_{\eta\alpha}(\omega_1)iG^0_{\beta\rho}(\omega_2)iG^0_{\nu\mu}(\omega_4)$$
$$\times iG^0_{\lambda\sigma}(\omega_3)2\pi\delta(\omega_1-\omega_2-\omega_5)$$
$$\times 2\pi\delta(\omega_4+\omega_5-\omega_3)\}$$
$$\times 2\pi\delta(\omega-\omega_1+\omega_2), \qquad (60.16)$$

第一级 Feynman 图解示于图 60.3. 在两项中的 ω_5 积分是一样的，而在第二项中改换傀变量 $\rho \rightleftharpoons \sigma$，并利用方程 (60.13) 就给出

$$\hbar\Pi^{(1)}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = \sum_{\eta\nu\rho\sigma} i\Pi^0_{\lambda\mu;\rho\nu}(\omega)[\langle\rho\sigma|V|\eta\nu\rangle - \langle\sigma\rho|V|\eta\nu\rangle]$$
$$\times i\Pi^0_{\eta\sigma;\alpha\beta}(\omega). \qquad (60.17)$$

这个表示式可用下面的写法阐明

$$\Pi^{(1)}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = \sum_{\eta\nu\rho\sigma}\Pi^0_{\lambda\mu;\rho\nu}(\omega)K^{\star}_{(1)}(\omega)_{\rho\nu;\eta\sigma}\Pi^0_{\eta\sigma;\alpha\beta}(\omega), \qquad (60.18)$$

$$\hbar K^{\star}_{(1)}(\omega)_{\rho\nu;\eta\sigma} \equiv -\langle\rho\sigma|V|\eta\nu\rangle + \langle\sigma\rho|V|\eta\nu\rangle, \qquad (60.19)$$

这里 $K^{\star}_{(1)}$ 中的两个矩阵元分别来自图60.3的第一个和第二个图解. 注意,最低级的正规粒子-空穴散射核 $K^{\star}_{(1)}$ 与 ω 无关.

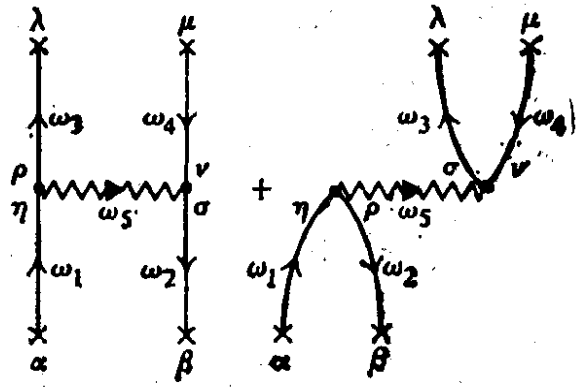


图 60.3 对方程 (60.16) 的 $\Pi^{(1)}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega)$ 有贡献的 Feynman 图解.

此外,这里出现了简单的表示式 (60.18),完全是因为相互作用势本身与 ω_5 无关,而 ω_5 在两个不同的图形中实际上是不同的.

其次,我们写出粒子-空穴散射的 Bethe-Salpeter 方程. 这方程将对 $K^{\star}$ 进行迭代,从而可以计算出极化传播函数 Π 直到一切级. 它取如下形式

$$\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = \Pi^{0}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) + \sum_{\lambda\nu\rho\sigma} \Pi^{0}_{\lambda\mu;\rho\nu} \times (\omega) K^{\star}(\omega)_{\rho\nu;\eta\sigma} \Pi_{\eta\sigma;\alpha\beta}(\omega), \quad (60.20)$$

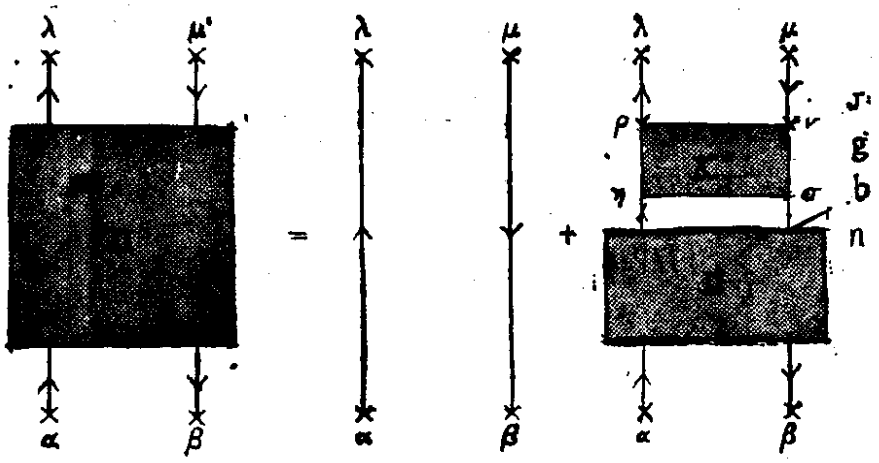


图 60.4 $\Pi_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega)$ 的 Bethe-Salpeter 方程 (60.20).

对应于图 60.4. 这里作了简化假定：核 $K^{\star}$ 只依赖于 ω，像在方程(60.19)中那样. 最一般的粒子-空穴 Bethe-Salpeter 方程不象在方程(60.20)中那样分解为因式，而是成为一个积分方程，包含着对频率积分的项[1].

方程(60.20)现在是一个简单的矩阵方程，它可以写成如下形式

$$\boldsymbol{\Pi}(\omega) = \boldsymbol{\Pi}^{0}(\omega) + \boldsymbol{\Pi}^{0}(\omega)\mathbf{K}^{\star}(\omega)\boldsymbol{\Pi}(\omega). \qquad (60.21)$$

这一矩阵关系式的逆关系式给出

$$[\Pi(\omega)^{-1}]_{\lambda\mu;\alpha\beta} = [\Pi^{0}(\omega)^{-1}]_{\lambda\mu;\alpha\beta} - K^{\star}(\omega)_{\lambda\mu;\alpha\beta}. \qquad (60.22)$$

$\Pi(\omega)$ 的所有矩阵元都在 $\hbar\omega = E_n - E_0$ 有极点，当然，方程(60.6)中分子为零的情况除外. 对于接近于极点的实 ω，矩阵元满足关系

$$\Pi^{*}_{\lambda\mu;\alpha\beta} = \Pi_{\alpha\beta;\lambda\mu}. \qquad (60.23)$$

因而对于实 ω，$\boldsymbol{\Pi}(\omega)$ 是厄密矩阵，并可用幺正变换对角化

$$U\boldsymbol{\Pi}(\omega)U^{-1} = \boldsymbol{\Pi}^{D}(\omega). \qquad (60.24)$$

这个关系式的逆关系式

$$U\boldsymbol{\Pi}(\omega)^{-1}U^{-1} = \boldsymbol{\Pi}^{D}(\omega)^{-1} \qquad (60.25)$$

表明，变换 U 也使 $\boldsymbol{\Pi}(\omega)^{-1}$ 对角化. 在系集的严格激发能 $\hbar\omega = E_n - E_0$，$\boldsymbol{\Pi}^{D}(\omega)$ 的一些对角矩阵元有极点. 这意味着 $\boldsymbol{\Pi}^{D}(\omega)^{-1}$ 的相应的对角矩阵元在该点有零点. 由于这些对角矩阵元正是 $\boldsymbol{\Pi}(\omega)^{-1}$ 的本征值，我们达到一般原理：**作为 ω 的函数的 $\boldsymbol{\Pi}(\omega)^{-1}$ 诸零本征值对应于系集的集体能级.** 因而，需要求解下列线性方程组

$$\sum_{\alpha\beta}[\Pi(\omega)^{-1}]_{\lambda\mu;\alpha\beta}C_{\alpha\beta} = \Lambda(\omega)^{-1}C_{\lambda\mu}, \qquad (60.26)$$

加上条件

$$\Lambda(\omega)^{-1} = 0. \qquad (60.27)$$

---

1) W. Czyz，前引文.

再与方程(60.22)相结合，可给出

$$\sum_{\alpha\beta}[\Pi^0(\omega)^{-1} - K^\star(\omega)]_{\lambda\mu;\alpha\beta}C_{\alpha\beta} = 0. \qquad (60.28)$$

它决定本征值 ω 和相应态矢量的系数 $C_{\alpha\beta}$.

无规周相近似

作为第一步近似，方程(60.28)中取 $K^\star \approx K^\star_{(1)}$，这把极化传播函数表示为图60.5所示类型的 Feynman 图解的和. 这些图解包括了关于电子气的讨论中所涉及的一切环形图解[1] 作为子集；并且，像在那里一样，这里的近似通常叫做无规周相近似. 利用方程(60.13 c)和(60.19)，方程(60.28)可以详细写出来成为

$$\sum_{\alpha\beta}(\delta_{\lambda\alpha}\delta_{\beta\mu}\{\theta(\alpha - F)\theta(F - \beta)[\epsilon - (\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)]$$
$$- \theta(F - \alpha)\theta(\beta - F)[\epsilon + (\epsilon_\beta - \epsilon_\alpha)]\}$$
$$- [-\langle\lambda\beta|V|\alpha\mu\rangle + \langle\beta\lambda|V|\alpha\mu\rangle])C_{\alpha\beta} = 0. \quad (60.29)$$

这一组线性齐次代数方程只对某些本征值 ϵ_n 有解.

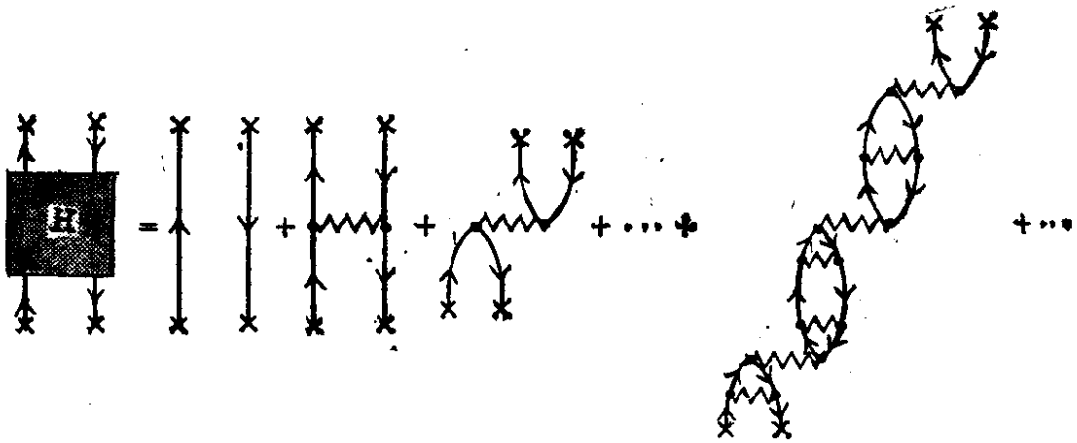


图 60.5 Π的 Feynman 图解在近似 $K^\star \approx K^\star_{(1)}$下求和.

1) 图 60.5 所示的较大一组图解正是习题 5.8 研究零声时所考虑的图解.

现在把方程(60.29)中的指标划分为，F以上和F以下两个部分，并改变傀指标使α和λ总是指粒子(α, $\lambda > F$)，而β和μ总是指空穴(β, $\mu < F$).

$$(\epsilon - \epsilon_{\lambda\mu})C_{\lambda\mu} - \sum_{\substack{\alpha>F\\ \beta<F}} \{[-\langle\lambda\beta|V|\alpha\mu\rangle + \langle\beta\lambda|V|\alpha\mu\rangle]C_{\alpha\beta} + [-\langle\lambda\alpha|V|\beta\mu\rangle + \langle\alpha\lambda|V|\beta\mu\rangle]C_{\beta\alpha}\} = 0 \qquad (\lambda > F,\ \mu < F), \tag{60.30 a}$$

$$-(\epsilon + \epsilon_{\lambda\mu})C_{\mu\lambda} - \sum_{\substack{\alpha>F\\ \beta<F}} \{[-\langle\mu\beta|V|\alpha\lambda\rangle + \langle\beta\mu|V|\alpha\lambda\rangle]C_{\alpha\beta} + [-\langle\mu\alpha|V|\beta\lambda\rangle + \langle\alpha\mu|V|\beta\lambda\rangle]C_{\beta\alpha}\} = 0 \qquad (\lambda > F, \mu < F). \tag{60.30 b}$$

定义

$$C_{\alpha\beta} \equiv S_\beta \phi^*_{\alpha-\beta} \qquad (\alpha > F,\ \beta < F), \tag{60.31 a}$$

$$C_{\beta\alpha} \equiv S_\beta \varphi^*_{\alpha-\beta} \qquad (\alpha > F,\ \beta < F), \tag{60.31 b}$$

把前面的方程组中的μ和β换成$-\mu$和$-\beta$，并乘以$S_{-\mu}$，

$$(\epsilon - \epsilon_{\lambda,-\mu})\phi^*_{\lambda\mu} - \sum_{\alpha\beta}\{S_{-\mu}S_{-\beta}[-\langle\lambda-\beta|V|\alpha-\mu\rangle + \langle-\beta\lambda|V|\alpha-\mu\rangle]\phi^*_{\alpha\beta} + S_{-\mu}S_{-\beta}[-\langle\lambda\alpha|V|-\beta-\mu\rangle + \langle\alpha\lambda|V|-\beta-\mu\rangle]\varphi^*_{\alpha\beta}\} = 0, \tag{60.32 a}$$

$$-(\epsilon + \epsilon_{\lambda,-\mu})\varphi^*_{\lambda\mu} - \sum_{\alpha\beta}\{S_{-\mu}S_{-\beta}[-\langle-\mu-\beta|V|\alpha\lambda\rangle + \langle-\beta-\mu|V|\alpha\lambda\rangle]\phi^*_{\alpha\beta} + S_{-\mu}S_{-\beta}[-\langle-\mu\alpha|V|-\beta\lambda\rangle + \langle\alpha-\mu|V|-\beta\lambda\rangle]\varphi^*_{\alpha\beta}\} = 0. \tag{60.32 b}$$

回忆一下方程(59.10)和(59.21)中的定义，我们就看到，这些方程可改写成

$$(\varepsilon_{\lambda,-\mu}-\varepsilon)\psi^*_{\lambda\mu}+\sum_{\alpha\beta}(v^*_{\lambda\mu;\alpha\beta}\psi^*_{\alpha\beta}+u^*_{\lambda\mu;\alpha\beta}\varphi^*_{\alpha\beta})$$

$$=0, \tag{60.33 a}$$

$$(\varepsilon_{\lambda,-\mu}+\varepsilon)\varphi^*_{\lambda\mu}+\sum_{\alpha\beta}(v_{\lambda\mu;\alpha\beta}\varphi^*_{\alpha\beta}+u_{\lambda\mu;\alpha\beta}\psi^*_{\alpha\beta})$$

$$=0, \tag{60.33 b}$$

它们正是上节详细分析过的 RPA 方程(59.22). 把这些结果和 Tamm-Dancoff 近似的结果比较一下是有益的.

Tamm-Dancoff 近似

只要集体激发的正的本征值 $\varepsilon=\varepsilon_n$ 处于未微扰粒子-空穴能量附近 (即 $\varepsilon_n\approx\varepsilon_\alpha-\varepsilon_\beta$), 最低级极化传播函数[方程(60.13 c)] 可以用

$$\Pi^0_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega)\approx\delta_{\lambda\alpha}\delta_{\beta\mu}\frac{\theta(\alpha-F)\theta(F-\beta)}{\omega-(\omega_\alpha-\omega_\beta)+i\eta} \tag{60.34}$$

替代. 在方程 (60.20) 和 (60.29) 中,这个近似意味着指标 α 和 λ 指的总是粒子,而下标 β 和 μ 指的总是空穴. 这样,方程 (60.33) 成为

$$(\varepsilon_{\lambda,-\mu}-\varepsilon)\psi^*_{\lambda\mu}+\sum_{\alpha\beta}v^*_{\lambda\mu;\alpha\beta}\psi^*_{\alpha\beta}=0. \tag{60.35}$$

这正是 TDA 方程.

现在可以看出 RPA 和 TDA 之间的关系. 取 TDA 中所用的零级近似粒子-空穴传播函数[方程(60.34)]的 Fourier 变换[方程 (60.5)]. 很显然, 这个量在时间中只向前传播. 相反地,方程 (60.13 c) 中的原来的零级粒子-空穴传播函数保持了对 ω 的全部对称性, 并在时间的两个方向上都传播. 因而,用 Feynman 图解来说, RPA 把 $K^{\star}_{(1)}$ 的两个最低级图解的一切可能的迭代加起来(图 60.5), 至于 TDA 则只把图解的一个子集加起来, 在这些图解中, 所有粒子-空穴对在时间

中向前传播. 这样，在任一瞬时，TDA 有而且只有一个粒子-空穴对出现，至于 RPA 则允许任意个数的粒子-空穴对同时出现.

由方程 (60.33) 显然可见， TDA 是 RPA 的极限情况，这极限就是，势的矩阵元要比未微扰能量小很多，或者更精确地说，

$$\frac{\langle V\rangle}{\epsilon_n + (\epsilon_\lambda - \epsilon_{-\mu})} \ll 1. \qquad (60.36)$$

在这种情况下，方程 (60.33) 解除耦合，而方程 (60.33a) 正好成为方程 (60.35). 一个等价的条件是，真正的本征值应接近于未微扰的组态能量，即 $\epsilon_n \approx \epsilon_\lambda - \epsilon_{-\mu}$. 因此，从未微扰粒子-空穴能量移动很大的激发态 (特别是移动到较低能量 $\epsilon_n \approx 0$ 的那些态)必须用 RPA 处理而不能用 TDA 来处理；这些一般是最集体化的态.

在 RPA 中建造 $\Pi(\omega)$.

现在的结果可与第 59 节的结果相结合，在 RPA 中显式地建造$\Pi(\omega)$. 方程 (60.31) 和 (59.17) 一起给出

$$C_{\alpha\beta} = S_\beta \psi^*_{\alpha-\beta} = S_\beta \langle \Psi_0 | b_{-\beta} a_\alpha | \Psi_n \rangle \quad (\alpha > F, \beta < F), \qquad (60.37a)$$

$$C_{\alpha\beta} = S_\alpha \varphi^*_{\beta-\alpha} = S_\alpha \langle \Psi_0 | a^\dagger_\beta b^\dagger_{-\alpha} | \Psi_n \rangle \quad (\beta > F, \alpha < F). \qquad (60.37b)$$

这些表示式可与方程 (59.4) 的粒子-空穴变换结合起来，

$$c^\dagger_\alpha c_\beta \doteq \theta(\alpha - F)\theta(F - \beta) a^\dagger_\alpha b^\dagger_{-\beta} S_\beta + \theta(\beta - F)\theta(F - \alpha) b_{-\alpha} a_\beta S_\alpha, \quad (\text{RPA}) \qquad (60.38)$$

因而我们指认

$$\langle \Psi_0 | c^\dagger_\alpha c_\beta | \Psi_n \rangle = C^{(n)}_{\beta\alpha}, \quad (\text{RPA}). \qquad (60.39)$$

其结果是 RPA 中的极化传播函数可以写成[参阅方程(60.6)]

$$\Pi^{\text{RPA}}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega) = \sum_n \left(\frac{C^{(n)}_{\lambda\mu} C^{(n)*}_{\alpha\beta}}{\omega - \omega_n + i\eta} - \frac{C^{(n)}_{\beta\alpha} C^{(n)*}_{\mu\lambda}}{\omega + \omega_n - i\eta} \right). \qquad (60.40)$$

这个表示式表征着在 RPA 中对方程(60.1)形式的外加微扰的线性响应. 因而，它允许我们研究电子散射、光子过程、弱相互作用、甚至高能核子散射引起的原子核态的激发（在 Born 近似适用于激发过程的限度内).

61. 真实的核力[1)]

到此为止，对有限系统的讨论是用相当一般的术语进行的，这些技巧适用于原子和分子，也适用于原子核. 本节将简短地讨论核子-核子力的奇异本性所引起的某些特殊问题. 刚性核（以及刚刚在核外的强吸引力）意味着，矩阵元 $\langle\alpha\beta|V\lambda\mu\rangle$ 必须用梯形图解的和来代替，就象在 Galitskii 或 Bethe-Goldstone 的方法中那样. 我们这里采用了后一种框架，是因为它比较简单.

闭壳层外两个核子：独立对偶近似

原则上，要研究一个具有奇异两体力的有限系统，第一步是要对有效的两体相互作用建造 Hartree-Fock 单粒子波函数. 这波函数是对梯形图解求和得出的. 这个和又取决于单粒子波函数的选择. 显然，这样一种自洽问题是很困难的. 作为示例，我们不讨论这个自洽问题，而直接假定单粒子波函数和能量已经从壳层模型的讨论中知道，从而考虑具有主闭壳层的二重幻核心(例如 He^6, O^{18}, Ca^{42} 等)外部的单个相互作用价

1) 本节的简化讨论，来自 J. F. Dawson, I. Talmi, and J. D. Walecka, *Ann. Phys.* (*N. Y.*) **18**:339 (1962); **19**: 330 (1962). 关于真实力的核谱学的透彻的处理，参阅 B. H. Brandow, *Rev. Mod. Phys.*, **39**: 771 (1967) 和 M. H. Macfarlane, Course XL, Nuclear Structure and Nuclear Reactions, in Proceedings of "The International School of Physics 'Enrico Fermi'" p.457, Academic Press, New York, 1969.

中子对或价质子对．这个简化了的问题，可作为研究具有奇异力的有限系统的原型．此外，它还可以直接与实验进行比较，因为从第 58 节知道，如果价核子间的相互作用是非奇异的，则矩阵元 $\langle j^2JM|V|j^2JM\rangle$ 决定这种原子核的谱．对于奇异相互作用，我们只计算在梯形近似下的相应矩阵元．

这里的情况示于图 61.1．两个全同的价核子占据着态的（简并）集合 $\mathscr{V}$，而核心 $\mathscr{C}$ 则是由二重幻闭壳层组成．设具有 A 个核子，即 Z 个质子和 N 个中子的原子核的总结合能由

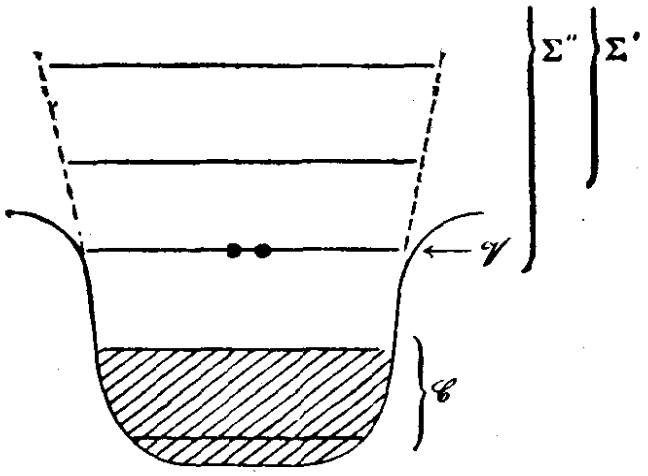


图 61.1　闭壳层外的两个核子．$\mathscr{V}$ 表示简并价能级，$\mathscr{C}$ 表示闭壳层核心．

$$ {}_ZB_N^A \equiv {}_ZE_N^A - Zm_pc^2 - Nm_nc^2 $$

表示．例如，价中子对的基态结合能 $BE(2N)$ 可以定义为

$$ BE(2N) \equiv {}_ZB_N^A - {}_ZB_{N-2}^{A-2} - 2[{}_ZB_{N-1}^{A-1} - {}_ZB_{N-2}^{A-2}]. \quad (61.1) $$

基本的问题是计算这个两粒子结合能，以及原子核的激发谱．为了达到这一目的，我们假定惰性核心只起着提供一个自洽的 Hartree-Fock 势的作用，其能级 $\mathscr{C}$ 已被填满．然后，我们在独立对偶近似下进行工作，并且写出价对的 Bethe-Goldstone 方程，它容许通过虚激发达到未被占据的任一状态．由于积分方程只取决于组合 $V\psi$，因而即令势是奇异的，它的解也有确定意义．

Bethe-Goldstone 方程

可从第 36 节的讨论，直接得到图 61.1 所示系统的 Bethe-Goldstone 方程[1)]

$$\psi_{n_1n_2}(1,2)=\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2)+\sum_{n_1'n_2'}{}''\frac{\varphi_{n_1'}(1)\varphi_{n_2'}(2)\langle n_1'n_2'|H_1|\psi_{n_1n_2}\rangle}{E_{n_1n_2}-E^0_{n_1'n_2'}},\quad(61.2\,a)$$

$$E_{n_1n_2}-E^0_{n_1n_2}=\langle n_1n_2|H_1|\psi_{n_1n_2}\rangle.\quad(61.2\,b)$$

这里指标 n 表示价对可采用的单粒子能级 $\left\{nlm_l\frac{1}{2}m_s\right\}$. 而且我们一开始就假定未微扰单粒子谱具有图 57.2 左边所示的形式. 相应的单粒子波函数是 φ_n，而 $E^0_{n_1n_2}$ 是核子对的初始未微扰能量. 微扰 H_1 由（奇异的）两粒子相互作用和未包含在起始近似中的剩余的单体作用组成. 在方程(61.2a)中，求和 $\sum''$ 遍及所有未被占据的单粒子态，如图 61.1 所示.

在现在的框架中，这些方程是严格的，但方程(61.2a)按其现有形式，并不很有用，因为 $\sum''$ 包括了与 $\varphi_{n_1n_2}$ 简并的态. 由于相应的严格本征值接近于 $E^0_{n_1n_2}$，这些简并态的能量分母变得很小. 消除这一困难的方法是重新开始并为 $\mathscr{S}$ 中的价粒子选择一组修订了的初态. 具体讲，我们可以考虑这些简并态的一个线性组合

$$\chi_\alpha(1,2)\equiv\sum_{n_1n_2\subset\mathscr{S}}C^{(\alpha)}_{n_1n_2}\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2),\quad(61.3)$$

而只要求变换是么正的

$$\sum_\alpha C^{(\alpha)*}_{n_1n_2}C^{(\alpha)}_{n_1'n_2'}=\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}.\quad(61.4)$$

---

1) 为了简化这些方程，我们略去了全同价核子对的波函数的反对称步骤.

在 $\mathscr{S}$ 中的两个粒子的波函数 $\Psi_\alpha(1,2)$ 的 Bethe-Goldstone 方程，现在可用这些新的态写成

$$\Psi_\alpha(1,2) = \chi_\alpha(1,2) + \sum_{\alpha' \neq \alpha} \frac{\chi_{\alpha'}(1,2)\langle \chi_{\alpha'}|H_1|\Psi_\alpha\rangle}{E_\alpha - E^0_{\mathscr{S}}} + \sum_{n_1' n_2'} \frac{\varphi_{n_1'}(1)\varphi_{n_2'}(2)\langle n_1' n_2'|H_1|\Psi_\alpha\rangle}{E_\alpha - E^0_{n_1' n_2'}}, \quad (61.5\,a)$$

$$E_\alpha - E^0_{\mathscr{S}} = \langle \chi_\alpha|H_1|\Psi_\alpha\rangle. \quad (61.5\,b)$$

在这些表示式中，本征值用 E_α 标记，而 $E^0_{\mathscr{S}}$ 则指 $\mathscr{S}$ 中核子对的未微扰能量. 方程 (61.5a) 中的和已分成两部分：一部分来自 $\mathscr{S}$ 中其他简并的未微扰态，剩下的部分 Σ' 包含至少一个向较高壳层的激发(见图 61.1). 由于小能量分母只出现于第一个和，我们将设法选择系数 $C^{(\alpha)}_{n_1 n_2}$ 使方程 (61.5a) 中的第一个和的分子恒为零，

$$\langle \chi_\alpha|H_1|\Psi_\beta\rangle = (E_\alpha - E^0_{\mathscr{S}})\delta_{\alpha\beta}. \quad (61.6)$$

在这种情况下，在方程 (61.5 a) 中只剩下第二个和；此外，Σ' 中的所有态都包含一个向较高壳层的激发，所以，分子一般小于分母，或者两者相差不大.

原来的方程 (61.2) 改用这种表述，仍然很难求解，因为在方程 (61.5 a) 的分母中出现严格的本征值. 但是，现在可以看到，Σ' 遍及一切这样的态，在这些态中，价粒子提升到激发态(在谐振子模型中，价粒子必须移动偶数个谐振子间距，以便参与宇称相同的态). 其结果是，在和 Σ' 中的所有能量分母与下面计算出来的能量移动 $E_\alpha - E^0_{\mathscr{S}}$ (几个兆电子伏) 相比，要大很多(在谐振子模型中至少有 $2\hbar\omega \approx 81$ 兆电子伏/$A^{\frac{1}{3}}$)，因而，在这些项中可以用 $E^0_{\mathscr{S}}$ 代替 E_α. 这个近似使我们可以写出

$$\Psi_\alpha(1,2) = \sum_{n_1 n_2 \subset \mathscr{S}} C^{(\alpha)}_{n_1 n_2}\phi^0_{n_1 n_2}(1,2), \quad (61.7)$$

这里 $\psi^0_{n_1n_2}(1,2)$ 是具有已知积分核的线性积分方程

$$\psi^0_{n_1n_2}(1,2) = \varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2) + \sum_{n_1'n_2'} \frac{\varphi_{n_1'}(1)\varphi_{n_2'}(2)\langle n_1'n_2'|H_1|\psi^0_{n_1n_2}\rangle}{E^0_{\mathscr{V}} - E^0_{n_1'n_2'}} \tag{61.8}$$

的解. 对矩阵元的附加条件 [方程 (61.6)] 成为

$$\sum_{n_1'n_2'\subset\mathscr{V}} [\langle n_1n_2|H_1|\psi^0_{n_1'n_2'}\rangle + (E^0_{\mathscr{V}} - E_\alpha)\delta_{n_1'n_1}\delta_{n_2'n_2}]C^{(\alpha)}_{n_1'n_2'} = 0, \tag{61.9}$$

这里用到方程(61.4). 这组线性齐次代数方程决定系数 $C^{(\alpha)}_{r_1n_2}$, 而令它们的系数行列式为零,就得出本征值 E_α. 显然, 方程 (61.7) 和 (61.8) 重新给出 (61.5a), 因为方程(61.6)的条件消除了方程 (61.5 a) 的第一个和, 而且在现在的近似下, 第二个和中的 $E_\alpha \approx E^0_{\mathscr{V}}$. 方程 (61.8) 和 (61.9) 一起构成具有初始简并态的有限系统的(近似的) Bethe-Goldsotne 方程[1].

谐振子近似

如果把 Hartree-Fock 单粒子波函数 φ_n 和能量 $E^0_{n_1n_2}$ 用谐振子的波函数和能量来近似, 上述讨论就可以大大简化. 在这情况下,微扰成为

$$H_1 = h_1(1) + h_2(2) + V(1,2), \tag{61.10}$$

这里 $V(1,2)$ 是二核子势, h_1 是单粒子算符, 它代表真正的 Hartree-Fock 势和谐振子势的差, (可以写成显式, $h_1 = \Delta V(r) - \alpha \mathbf{l}\cdot\mathbf{s}$, 第一项是势阱的改变,它导致从图 57.2 左边的

1) 在这一方面可参阅 H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **103**: 1353 (1956) 和 C. Bloch and J. Horowitz, *Nucl. Phys.* **8**: 91 (1958). 如果引入总角动量的本征态,方程组 (61.9) 的基又可以按通常的方式约化. 我们把这一点留给深入学习的读者作为练习.

谱变为图 57.3 左边的谱，第二项则是自旋-轨道相互作用.)
我们只用第一级微扰论处理 h_1 就够了，方程 (61.9) 成为

$$\sum_{n_1'n_2'\subset\mathscr{S}} [\langle n_1n_2|V|\psi^0_{n_1'n_2'}\rangle + \langle n_1n_2|h_1(1)+h_1(2)|n_1'n_2'\rangle + (E^0_{\mathscr{S}} - E_\alpha)\delta_{n_1'n_1}\delta_{n_2'n_2}]C^{(\alpha)}_{n_1'n_2'} = 0. \tag{61.11}$$

在计算的最后一步，可以引进使 h_1 对角化的单粒子态

$$\left\{nl\,\frac{1}{2}\,jm_j\right\},$$

得出的单粒子组态能量 $E^0 + \langle h_1\rangle + \langle h_2\rangle \equiv \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ 可从相邻奇核的能量按经验定出.

求得能级 E_α 和系数 $C^{(\alpha)}_{n_1n_2}$ 的第一步是求解近似的 Bethe-Goldstone 方程 (61.8)，其中 $H_1 \equiv V$. 于是，所得的波函数 $\psi^0_{n_1n_2}$ 可以决定方程 (61.11) 中的 V 的矩阵元. 选择谐振子波函数 φ_n，可以得到一个很重要的简化，因为两体波函数 $\varphi_{n_1}\varphi_{n_2}$ 是如下哈密顿函数的本征态:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{x}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{x}_2^2. \tag{61.12}$$

借助于如下的坐标变换

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \dfrac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2), & \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \\ \mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}, & \mathbf{p} = \dfrac{1}{2}(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1), \end{cases} \tag{61.13}$$

H_0 可以写成

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{4m} + m\omega^2\mathbf{X}^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{m} + \frac{1}{4}m\omega^2\mathbf{x}^2, \tag{61.14}$$

这样就把价粒子对的质心运动和相对运动分离开来. 方程 (61.14)那样写出的 H_0 的本征态具有 $\varphi_N(\mathbf{X})\varphi_n(\mathbf{x})$的形式，这

里的量子数计有属于质心的 $N\equiv\{N\mathscr{L}\mathscr{M}_{\mathscr{L}}\}$，以及属于相对波函数的 $n\equiv\left\{nlm_l\frac{1}{2}m_{s_1}\frac{1}{2}m_{s_2}\right\}$. 这些态中的每一个都可以展开为原来的态 $\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2)$ 的线性组合，这些 $\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2)$ 具有相同的两粒子能量(因而也是相同的 H_0 的本征值)，因为它们构成同一哈密顿函数 H_0 的本征态的完全集合. 这样，我们有

$$\varphi_N(\mathbf{X})\varphi_n(\mathbf{x})=\sum_{n_1n_2\subset\mathscr{D}}\langle n_1n_2|Nn\rangle\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2),\quad(61.15)$$

这里 $\mathscr{D}$ 表示与初态简并的一切可能的两粒子态. 这些正交变换括号[1] $\langle n_1n_2|Nn\rangle$ 已大量地列成表格[2]. 由方程(61.15)和(61.8)得到

$$\langle n_1n_2|V|\phi^0_{n_1'n_2'}\rangle=\sum_{NnN'n'\subset\mathscr{D}_{\mathscr{V}}}\langle n_1n_2|Nn\rangle\langle N'n'|n_1'n_2'\rangle\times\langle Nn|V|\phi^0_{N'n'}\rangle.\quad(61.16)$$

[注意方程(61.15)中的对 n_1n_2 求和可以直接作用于方程(61.8)右边的波函数 $\phi^0_{n_1n_2}$，因为对于 $\mathscr{D}_{\mathscr{V}}$ 中的所有简并态，量 $E^0_{\mathscr{V}}$ 是相同的.

ϕ^0_{Nn} 的计算由于方程(61.8)中的有限制的求和 Σ' 而复杂化，这方程把价粒子对的相对波函数与质心耦合起来. 因此，把和改写为

$$\sum_{n_1n_2}{}'\equiv\sum_{n_1n_2\notin\mathscr{D}_{\mathscr{V}}}-\sum_{n_1\text{或}n_2\subset\mathscr{C}}\quad(61.17)$$

将是方便的. 第一项遍及能量不为 $E^0_{\mathscr{V}}$ 的一切态求和，第二项消除了违背 Pauli 原理的态. 暂且忽略第二项(即 Pauli 原理改正项)，在本节中较后的地方再回到这一项. 如果只保留第

1) I. Talmi, *Helv. Phys. Acta.*, **25**: 185 (1952).

2) T. A. Brody and M. Moshinsky, "Tables of Transformation Brackets", Monografias Del Instituto de Fisica, Mexico City. 1960.

一项，则相应的波函数 $\tilde{\psi}_0$ 满足方程

$$\tilde{\psi}^0_{Nn}(\mathbf{X},\mathbf{x}) = \varphi_N(\mathbf{X})\varphi_n(\mathbf{x}) + \sum_{N'n' \notin \mathscr{D}_\varphi} \frac{\varphi_{N'}(\mathbf{X})\varphi_{n'}(\mathbf{x})\langle N'n'|V|\tilde{\psi}^0_{Nn}\rangle}{E^0_\varphi - E^0_{N'n'}}. \tag{61.18}$$

它是把方程 (61.8) 和 (61.15) 结合起来而得到的. 由于 V 只与相对坐标有关，方程 (61.18) 和 (61.16) 中的矩阵元对于 N 是对角的，而方程 (61.18) 的解具有如下形式

$$\tilde{\psi}^0_{Nn}(\mathbf{X},\mathbf{x}) = \varphi_N(\mathbf{X})\tilde{\psi}^0_n(\mathbf{x}). \tag{61.19}$$

在简并态集 $\mathscr{D}_\varphi$ 的范围内，方程 (61.16) 中的矩阵元 $\langle Nn|V|\tilde{\psi}^0_{Nn'}\rangle$ 对于相对量子数也是对角的[1]，而方程(61.16)和(61.18)取如下形式

$$\langle n_1n_2|V|\tilde{\psi}^0_{n_1'n_2'}\rangle = \sum_{Nn}\langle n_1n_2|Nn\rangle \times \langle Nn|n_1'n_2'\rangle\langle n|V|\tilde{\psi}^0_n\rangle, \tag{61.20a}$$

$$\tilde{\psi}^0_n(\mathbf{x}) = \varphi_n(\mathbf{x}) + \sum_{n' \neq n} \frac{\varphi_{n'}(\mathbf{x})\langle n'|V|\tilde{\psi}^0_n\rangle}{E_n - E^0_{n'}}. \tag{61.20b}$$

方程 (61.20b) 中的能量分母又是至少有 $2\hbar\omega$ 那么大；因而，在前面所取的同一近似程度下，我们可以把这个方程改写成

$$\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) = \varphi_n(\mathbf{x}) + \sum_{n' \neq n} \frac{\varphi_{n'}(\mathbf{x})\langle n'|V|\tilde{\psi}_n\rangle}{E_n - E^0_{n'}}, \tag{61.21a}$$

这里 $\tilde{\psi}_n$ 是相应于本征值

$$E_n - E^0_n \equiv \langle n|V|\tilde{\psi}_n\rangle \tag{61.21b}$$

的本征函数. 现在问题已经解决，因为 (61.21) 正是 Schrödinger 方程

---

1) 假定 V 对于 l 是对角的.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2+\frac{1}{4}m\omega^2x^2+V(x)\right]\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)\quad(61.22)$$

的改写形式. 因此，方程 (61.20 a) 中所需要的矩阵元可借助于方程 (61.21b) 从微分方程 (61.22) 的分立本征值直接得出.

方程 (61.22) 的未微扰 ($V=0$) 解，已在方程 (57.7) 到 (57.12) 中给出；图 61.2 就各种不同 l 值绘出这些解. 为了比较，我们也给出对于势

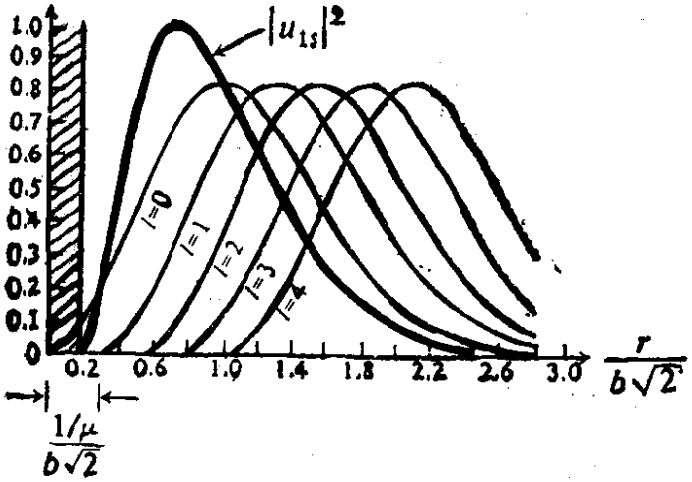


图 61.2 存在着势 (61.23) 的情况下，方程 (61.22) 的未微扰波函数 u_{1l}^0 的平方，以及方程 (61.22) 的严格 s 波解 u_{1s} 的平方. 波函数按 $\int|u_{1l}|^2dr=1$ 归一化. 还表明，方程(61.23)中的刚性核和吸引相互作用的力程. [引自 J. D. Dawson, I. Talmi, and J. D. Walecka, *Ann. Phys.* (*N. Y.*) **18**: 339 (1962)].

$$V=\begin{cases}\infty & (r<c)\\ -V_0\dfrac{e^{-\mu r}}{\mu r} & (r>c),\end{cases}\qquad(61.23)$$

($V_0=434$ 兆电子伏，$\mu=1.45$ 费米$^{-1}$，$c=0.4$ 费米) 的严格(数值) s 波解，势的参数决定于与 $^1S_0$ 核子-核子相移的拟合. 在整个计算中，振子参数取作 $b=(\hbar/m\omega)^{\frac{1}{2}}=1.70$ 费

米，这个数值适合于 O^{18}. 显然，只有 s 波受到势的影响很大，相关的和未相关的波函数很相似，因而相关性在很小距离才是重要的.

这个理论已应用于 O^{18}，在 O^{18} 那里，初始未微扰组态具有 $2s$-$1d$ 振子壳层上的两个价中子. 用 Brueckner-Gammel-Thaler 核子-核子势，方程 (61.11)，(61.20 a)，(61.21 b) 和 (61.22) 给出图 61.3 所示的谱[1]. 图中还示出用方程 (59.81) 的非奇异力并在方程 (61.16) 中作代换 $\phi^0_{N'n'} \to \varphi_{N'}\varphi_{n'}$ 所得

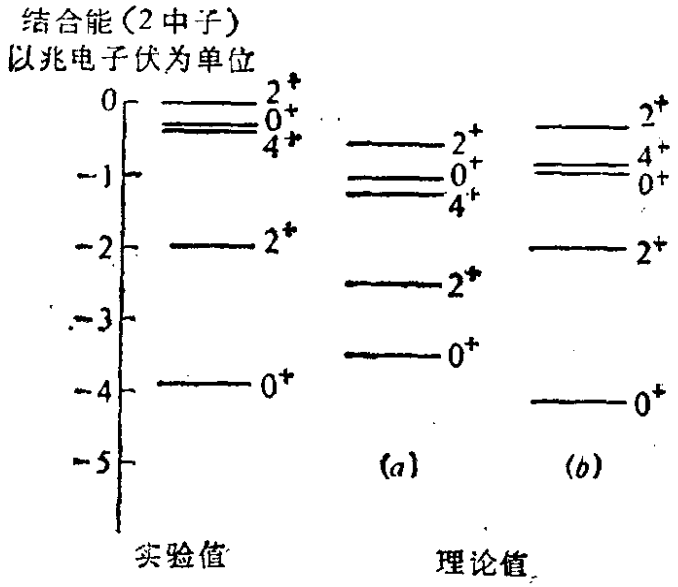


图 61.3 O^{18} 的两中子结合能和低激发谱的实验值和理论值. 理论结果是用 (a) 奇异的 Brueckner-Gammel-Thaler 核子-核子势，(b) 方程 (59.81) 的非奇异 Serber-Yukawa 势算出的[引自 J. F. Dawson, I. Talmi, and J. D. Walecka, *Ann. Phys.* (*N. Y.*), **18**: 339 (1962); **19**:350 (1962)].

到的结果. 在这两种情况下，单粒子组态能量都取自 O^{17}: $\varepsilon(1d_{\frac{5}{2}}) \equiv 0$，$\varepsilon(2s_{\frac{1}{2}}) = +0.871$ 兆电子伏，$\varepsilon(1d_{\frac{3}{2}}) = +5.08$ 兆电子伏.

1) J. F. Dawson et al.，前引文.

Pauli 原理改正

为计及 Pauli 原理的影响，定义投影算符 P 和 Q，它们分别代表方程(61.17)右边的第一个和第二个有限制的和。如果将方程(61.8)中的 H_1 换作 V，并将方程乘以 V，它就可以改写为迭代算符方程

$$G = V + V\frac{P-Q}{E_0+H_0}V + V\frac{P-Q}{E_0-H_0}V\frac{P-Q}{E_0-H_0}V + \cdots, \quad (61.24)$$

这里算符 G 定义为

$$G\varphi_{n_1}\varphi_{n_2} \equiv V\psi^0_{n_1n_2}. \quad (61.25)$$

将方程(61.24)加以整理，可以给出

$$G = G^0 - G^0\frac{Q}{E_0-H_0}G^0 + \cdots, \quad (61.26\,a)$$

$$G_0 \equiv V + V\frac{P}{E_0-H_0}V + V\frac{P}{E_0-H_0}V\frac{P}{E_0-H_0}V + \cdots \quad (61.26b)$$

方程(61.26 b)和(61.18)的比较表明，G^0 对应于刚才讨论过的波函数

$$G^0\varphi_{n_1}\varphi_{n_2} \equiv V\tilde{\psi}^0_{n_1n_2}. \quad (61.27)$$

这样，第一级 Pauli 原理改正由下式给出

$$\Delta G_{pp} = -G^0\frac{Q}{E_0-H_0}G^0. \quad (61.28)$$

即使对于奇异势，这关系式中的矩阵元现在也是有限的. 此外，分母的量值又是 $\geqslant 2\hbar\omega$，因而方程(61.28)代表对能级的很小改正（<0.5 兆电子伏）. 这个效应已包含在图 61.3 a 之

中.

推广计算其他物理量

真实力的核谱学已经得到广泛的发展[1]. 最完备的计算是 Kuo 和 Brown[2] 的，他们在有效相互作用中还计入核心极化项(图 61.4).

显然，独立对偶方法也可用来求原子核的基态性质. Eden 等人曾用谐振子框架计算了 O^{16} 的结合能和密度[3]. 另一种多少有些不同的处理方法是把按核物质算出的 G 矩阵，用作有限核的 Hartree-Fock[4] 或 Thomas-Fermi 理论[5] 中的有效势. 关于有限核的 G 矩阵，还未有人作过完整自洽的计算.



$V_{有效}$ V $V_{核心极化}$

图 61.4 Kuo 和 Brown 的有效相互作用.

习 题

15.1 试证如下的论断：方程 (56.17) 的对应于不同本

1) B. H. Brandow. 前引文; M. H. Macfarlane. 前引文.
2) T. T. S. Kuo and G. E. Brown, *Nucl. Phys.* **85**: 40 (1966); 也可参阅 B. R. Barrett and M. W. Kirson, *Phys. Letters.***27B**:544 (1968).
3) R. J. Eden, V. J. Emery, and S. Sampanthar, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A 253**: 177 (1959); **A 253**: 186 (1959); 也可参阅 H. S. Köhler and R. J. McCarthy, *Nucl. Phys.*, **86**: 611 (1966).
4) K. A. Brueckner, A. M. Lockett, and M. Rotenberg, 前引文，它还包含了其它参考文献. 关于这一方法的综述参阅 M. Baranger, "Proceedings of the International Nuclear Physics Conference, Gatlinburg, Tennessee", p.659, Academic Press, New York, 1967; 以及 Course XL. Nuclear Structure and Nuclear Reactions, in Proc. of "The International School of Physics 'Enrico Fermi'," p.511, Academic Press, New York, 1969.
5) H. A. Bethe *Phys. Rev.* **167**: 879 (1968).

征值的解是正交的，而简并态则总可以正交化.

15.2 从方程 (57.20) 出发，试推导壳层模型磁矩的 Schmidt 结果[方程 (57.22)].

15.3 试推导单粒子壳层模型中的四极矩的方程 (57.25).

15.4 证明方程 (58.33).

15.5 利用第 58 节的二次量子化技术，证明对于偶 N.

$$\frac{1}{2j+1}|\langle j^N 0;\sigma=0\|\hat{T}_J\|j^N J;\sigma=2\rangle|^2$$

$$=\frac{1}{2J+1}\left(2N\frac{2j+1-N}{2j-1}\right)\left\{\frac{1}{2j+1}|\langle j\|T_J\|j\rangle|\right\}^2.$$

在多粒子壳层模型中，注意观察这一跃迁强度随着 N 的增加而增强，并在半满壳层情况下达到极大值.

15.6 考虑奇-奇核在 j_1 壳层上有 p 个质子，在 j_2 壳层上有 n 个中子. 如果质子和中子都处于正常耦合壳层模型基态，试证，方程 (58.6) 中那种类型的中子-质子势所导致的能量分裂(在最低级微扰论中)，可以通过代换

$$\langle j_1^p j_1 j_2^n j_2 J|\hat{V}|j_1^p j_1 j_2^n j_2 J\rangle \rightarrow$$

$$\frac{2j_1+1-2p}{2j_1-1}\cdot\frac{2j_2+1-2n}{2j_2-1}\langle j_1 j_2 J|V|j_1 j_2 J\rangle$$

而计算出来. 注意观察，只要这两壳层之一半满，这一量即为零；而分裂完全来自相互作用的自旋无关部分.

15.7 证明，方程 (58.55) 中的态具有指出的量子数.

15.8 (a) 证明；在方程 (58.55) 的三粒子态中，方程 (58.37) 的两体势的矩阵元由下式给出

$$\langle j^3 JM|\hat{V}|j^3 JM\rangle=3\sum_{\lambda}|\langle j^3 J|\}j^2(\lambda)jJ\rangle|^2\langle j^2\lambda|V|j^2\lambda\rangle,$$

这里部分家系 (parentage) 系数由如下关系定义

$$3|\langle j^3 J|\}j^2(\lambda)jJ\rangle|^2 = N^2\Big[\delta_{\lambda k}\delta(jkJ)\delta(j^2k)$$

$$+ 2[(2k+1)(2\lambda+1)]^{\frac{1}{2}}\begin{Bmatrix} j & j & k \\ j & J & \lambda \end{Bmatrix}\Big]^2.$$

$$N^{-2} = 1 + 2(2k+1)\begin{Bmatrix} j & j & k \\ j & J & k \end{Bmatrix}.$$

[符号 $\delta(j_1j_2j_3)$ 意味着角动量必须相加，即 $|j_1 - j_2| \leqslant j_3 \leqslant j_1 + j_2$].

(b) 证明，对于方程 (58.54) 中的态，同样的关系式成立(取 $k = 0$).

15.9 设 O^{18} 中的 0^+ (基态)，2^+ (2.00 兆电子伏)，和 4^+ (3.55 兆电子伏)属于 $(d_{\frac{5}{2}})^2$ 组态.

(a) 证明，在 $(d_{\frac{5}{2}})^3$ 组态中三个全同粒子的仅有的可能的 J^π 值是 $(3/2)^+$，$(5/2)^+$ 和 $(9/2)^+$ (参阅 M. G. Mayer and J. H. D. Jensen，前引书，p. 64).

(b) 利用方程 (58.39) 和习题 15.8 的结果预言 $(d_{\frac{5}{2}})^3$ 组态的各态的位置. 与 O^{19} 的如下实验结果作比较：$(5/2)^+$(基态)，$(2/3)^+$(0.096 兆电子伏)和 $(9/2)^+$ (2.77 兆电子伏).

15.10 在玻色子近似中计算习题 15.5 中的矩阵元.

15.11 在玻色子近似中，对于吸引 δ 函数势 [方程 (58.18)] 计算 j^N 组态 (N 为偶)的谱.

15.12 将玻色子近似推广到将近填满的壳层.

15.13 试就如下形式的势

$$V = V_0(x_{12}) + V_1(x_{12})\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2,$$

证明方程 (58.69). 设径向波函数为实的.

15.14 (a) 用方程 (58.64) 的变换后的算符写出角动量 $\hat{\mathbf{J}}$.

(b) 证明态 $|\mathbf{O}\rangle$ 的 $J = 0$

(c) 证明态$|\mathbf{O}\rangle$具有偶宇称.

15.15 验证方程 (59.80)

15.16 设D为厄密的单粒子算符的和

(a) 证明恒等式

$$\langle\Psi_0|[\hat{D},[\hat{H},\hat{D}]]|\Psi_0\rangle=2\sum_n(E_n-E_0)|\langle\Psi_n|\hat{D}|\Psi_0\rangle|^2.$$

(b) 如果右边是在 RPA 近似下计算出来的，证明其结果等同于计算在 Hartree-Fock 壳层模型基态中的左边. 每当双重对易式为 c 数时(见习题 15.17)，RPA 将因而保存这个以能量为权重的求和定则[1].

15.17 (a) 证明相对于质心量度的原子核电偶极矩由下式给出

$$\mathbf{D}=\sum_{j=1}^{A}\mathbf{x}(j)\left[\frac{1}{2}\tau_3(j)-\frac{1}{A}T_3\right].$$

(b) 如果相互作用势是 $V(x_{ij})$ 形式的，推导$N=Z$的偶极求和定则，

$$4\sum_n(E_n-E_0)|\langle\Psi_n|\mathbf{D}|\Psi_0\rangle|^2=\frac{3\hbar^2A}{2m}$$

(c) 证明如果 $N\fallingdotseq Z$，右边应乘以 $4NE/A^2$

15.18 如果算符 $\hat{D}$ 与 $\hat{H}$ 可对易，(例如总动量 $\hat{\mathbf{P}}$，总角动量 $\hat{\mathbf{J}}$. 注意这些算符引起整个系统的平动和转动) 讨论习题 15.16 的结果的含义[2].

15.19 (a) 利用方程(60.40)关于 $\Pi^{RPA}_{\lambda\mu;\alpha\beta}(\omega)$ 的结果，讨论有限系统对方程 (60.1) 形式的微扰的线性响应.

(b) 像第 17 节那样计算非弹性电子散射截面.

15.20 推导图 61.4 中所示的核心极化势的表示式.

---

1) D. J. Thouless, *Nucl. Phys.*, **22**: 78 (1961).

2) 同上.

附　　录

A. 若干定积分[1)]

Γ 函数 $\Gamma(z)$ 和 Riemann ζ 函数 $\zeta(z)$ 的定义如下：

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty dt\, e^{-t} t^{z-1} \quad (\mathrm{Re}\ z > 0),$$

$$\zeta(z) \equiv \sum_{p=1}^{\infty} p^{-z} \qquad (\mathrm{Re}\ z > 1).$$

这些定义式仅仅在复 z 平面的特定区域上收敛，但可以用下列一般关系式进行解析延拓，

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z},$$

$$2^{1-z}\Gamma(z)\zeta(z)\cos\left(\frac{1}{2}\pi z\right) = \pi^z \zeta(1-z).$$

Γ 函数还满足函数方程

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z),$$

因而在 z 为整数时，它就是阶乘函数，

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (n \text{ 为整数}).$$

双 Γ 函数 $\psi(z)$ 是 Γ 函数的对数导数

$$\psi(z) = \frac{d}{dz}\log\Gamma(z) = \frac{1}{\Gamma(z)}\frac{d\Gamma(z)}{dz}.$$

当 $z = 1$，它成为

1) 这里我们采用下面这本书的记号：E. T. Whittaker and G. N. Watson, "Modern Analysis," 4th ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1962. 这些关系式中的大多数在该书中均有证明.

$$\psi(1)=\int_0^\infty dt e^{-t}\ln t\equiv-\gamma,$$

这里 γ 是 Euler 常数. 一些有用数值列表如下

$$\zeta(0)=-\frac{1}{2},$$

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\approx 2.612,$$

$$\zeta(2)=\pi^2/6\approx 1.645,$$

$$\zeta\left(\frac{5}{2}\right)\approx 1.341,$$

$$\zeta(3)\approx 1.202,$$

$$\zeta(4)=\pi^4/90\approx 1.082,$$

$$\zeta'(0)=\left(\frac{d\zeta(z)}{dz}\right)_{z=0}=-\frac{1}{2}\ln(2\pi),$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}\approx 1.772,$$

$$\Gamma(1)=0!=1,$$

$$\Gamma\left(\frac{5}{4}\right)\approx 0.9064,$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\approx 0.8862,$$

$$\Gamma\left(\frac{7}{4}\right)\approx 0.9191,$$

$$\gamma\approx 0.5772,$$

$$e^{\gamma}\approx 1.781.$$

有许多级数和定积分可用上述函数表示[1]:

1) 在这个表中,除最后一个积分外,均取自 H. B. Dwight, "Tables of Integrals and Other Mathematical Data",4th ed., chap. 12, The Macmillan Company, New York, 1964.

$$\sum_{p=0}^{\infty}\frac{1}{(2p+1)^n}=(1-2^{-n})\zeta(n)\qquad(n>1),$$

$$\int_0^{\infty}dx\,\frac{x^{n-1}}{e^x-1}=\Gamma(n)\zeta(n)\qquad(n>1),$$

$$\int_0^{\infty}dx\,\frac{x^{n-1}}{e^x+1}=(1-2^{1-n})\Gamma(n)\zeta(n)\qquad(n>0),$$

$$\int_0^{\infty}dx\,x^{n-1}\operatorname{csch}x=\int_0^{\infty}dx\,\frac{x^{n-1}}{\sinh x}$$

$$=2(1-2^{-n})\Gamma(n)\zeta(n)\qquad(n>1),$$

$$\int_0^{\infty}dx\,x^{n-1}\operatorname{sech}x=\int_0^{\infty}dx\,\frac{x^{n-1}}{\cosh x}$$

$$=2\Gamma(n)\sum_{p=0}^{\infty}(-1)^p(2p+1)^{-n}\ (n>0),$$

$$\int_0^{\infty}dx\,x^{n-1}\operatorname{sech}^2x=\int_0^{\infty}dx\,\frac{x^{n-1}}{\cosh^2x}$$

$$=2^{2-n}(1-2^{2-n})\Gamma(n)\zeta(n-1)\ (n>0),$$

$$\int_0^{1}dx\,x^{m-1}(1-x)^{n-1}=\int_0^{\infty}dx\,\frac{x^{m-1}}{(1+x)^{m+n}}$$

$$=\frac{\Gamma(m)\Gamma(n)}{\Gamma(m+n)},$$

$$\int_0^{\infty}dx\,\ln x\operatorname{sech}^2x=\left[\frac{\partial}{\partial n}\int_0^{\infty}dx\,x^{n-1}\operatorname{sech}^2x\right]_{n=1}$$

$$=-\ln\frac{4e^{\gamma}}{\pi}.$$

Bessel 函数 $K_0(x)$ 可以用积分表示定义如下，

$$K_0(x)\equiv\int_0^{\infty}dt\,e^{-x\cosh t},$$

我们求得

$$\int_0^{\infty}dx\,K_0(x)=\int_0^{\infty}dt\operatorname{sech}t$$

$$= 2\left(1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \cdots\right)$$

$$= 2\arctan 1 = \frac{\pi}{2}.$$

B. 角动量理论的综述[1)]

基本对易关系

这里的出发点是一组基本的对易关系

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k, \tag{B.1}$$

其中 ε_{ijk} 是一个完全反对称的单位张量，而所有角动量都以 $\hbar$ 为单位. 虽然 **J** 可以是一次量子化算符

$$L_x = \frac{1}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \text{等},$$

或二次量子化算符

$$\hat{L}_x = \int \hat{\psi}^\dagger(x)\frac{1}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\hat{\psi}(x)d^3x, \quad \text{等},$$

或 Pauli 矩阵

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}.$$

但方程 (B.1) 与任何特定表象无关，一切结果仅仅取决于基本的对易关系. 定义升算符和降算符，

---

1) 这里的讨论是很简略的. 关于较详细的讨论可参阅任何一本量子力学教科书，特别是关于角动量理论方面的论著，例如，A. R. Edmonds,“Angular Momentum in Quantum Mechanics,” Princeton University Press, Princeton, N. J., 1957 或 H. E. Rose, “Multipole Fields”, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1955. 本书这里的处理是完全遵照 Edmonds 一书的.

$$J_\pm \equiv J_x \pm iJ_y, \tag{B.2}$$

以及总角动量平方算符

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}[J_+J_- + J_-J_+]. \tag{B.3}$$

容易验证如下对易关系

$$[\mathbf{J}^2, J_\pm] = [\mathbf{J}^2, J_z] = 0,$$
$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm. \tag{B.4}$$

因而算符 $\mathbf{J}^2$ 和 J_z 可以同时对角化，本征态将用 $|jm\rangle$ 标记. 由对易关系 (B.1)，容易证明[1]

$$J_\pm|jm\rangle = A(j, \mp m)|jm \pm 1\rangle, \tag{B.5}$$

这里

$$A(jm) = [(j + m)(j - m + 1)]^{\frac{1}{2}} \tag{B.6}$$

规定了一种特殊的周相选择，而

$$\mathbf{J}^2|jm\rangle = j(j + 1)|jm\rangle, \tag{B.7}$$
$$J_z|jm\rangle = m|jm\rangle.$$

一般，我们要处理态 $|\gamma jm\rangle$，这里 γ 代表其余的可观察量的集合，而

$$[\Gamma, J^2] = [\Gamma, J_z] = 0.$$

两个角动量的耦合：Clebsch-Gordan 系数

考虑两个可对易的角动量的相加

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2, \quad [\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2] = 0, \tag{B.8}$$

这里 $\mathbf{J}_1$ 和 $\mathbf{J}_2$ 可以属于不同的粒子或者作用在不同的空间中 (例如，$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$). 我们立即可以验证

$$[\mathbf{J}, \mathbf{J}_1^2] = [\mathbf{J}, \mathbf{J}_2^2] = [\mathbf{J}, \mathbf{J}^2] = 0. \tag{B.9}$$

因而可以规定这些可对易算符的一个完全集合.

---

1) 参阅，例如， L. I. Schiff, "Quantum Mechanics", 3d ed., p. 200, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968.

1. $\Gamma, \mathbf{J}_1^2, J_{1z}, \mathbf{J}_2^2, J_{2z}$.

另一个可能的选择是，

2. $\Gamma, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$.

这两种描述都是完全的，但由总的旋转不变性可知 j 和 m 是运动常数，所以第二个集合较为方便. 由于这些基是等价的，因而它们之间必然以么正变换相联系，

$$|\gamma j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm\rangle |\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle. \quad \text{(B.10)}$$

这一组数字系数叫做 Clebsch-Gordan (CG) 系数；由于变换只涉及波函数的角度部分，CG 系数与 γ 无关[这一结果可以用显式构造来证明，参阅方程(B.17)]. 由于态 $|\gamma j_1 j_2 jm\rangle$ 和态 $|\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ 分别是正交而完全的，所以有如下三个关系式：

$$\begin{aligned}
&\langle \gamma j_1 m_1 j_2 m_2 | \gamma j_1 m_1' j_2 m_2'\rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}, \\
&\langle \gamma j_1 j_2 jm | \gamma j_1 j_2 j' m'\rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}, \qquad \text{(B.11)} \\
&\sum_{jm} |\gamma j_1 j_2 jm\rangle \langle \gamma j_1 j_2 jm| \\
&\qquad = \sum_{m_1 m_2} |\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle \gamma j_1 m_1 j_2 m_2|.
\end{aligned}$$

由此得出：

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 j' m' | j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm\rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}, \\
&\sum_{j'm} \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | j_1 j_2 jm\rangle \langle j_1 j_2 jm | j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}. \qquad \text{(B.12)}
\end{aligned}$$

用有限基 $|\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ 把算符

$$J_z = J_{1z} + J_{2z}, \qquad \text{(B.13a)}$$

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2, \qquad \text{(B.13b)}$$

对角化，可求得 CG 系数. 由于算符 $\mathbf{J}_1^2$ 和 $\mathbf{J}_2^2$ 已经是对角的，因而只需要将 J_z 和 $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$ 对角化，这里

$$2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 = J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} + 2J_{1z}J_{2z}. \qquad \text{(B.14)}$$

对于第一个算符，我们写出

$$J_z|\gamma j_1 j_2 j m\rangle = m|\gamma j_1 j_2 j m\rangle, \qquad \text{(B.15)}$$

并利用方程 (B.10) 和 (B.13a) 得出结论：如 $m_1 + m_2 \neq m$，则

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = 0.$$

对于第二个算符，我们可以把由方程 (B.13 b) 得出的关系

$$2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2|\gamma j_1 j_2 j m\rangle = \alpha_J|\gamma j_1 j_2 j m\rangle,$$

$$\alpha_J \equiv j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1). \qquad \text{(B.16)}$$

和方程 (B.14)以及(B.5) 结合起来，从而求得 CG 系数的一组齐次线性方程

$$\begin{aligned}(2m_1m_2 - \alpha_J)\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle &+ A(j_1, m_1+1)\\ &\times A(j_2, -m_2+1)\langle j_1 m_1 + 1 j_2 m_2 - 1 | j_1 j_2 j m\rangle\\ &+ A(j_1, -m_1+1)A(j_2, m_2+1)\langle j_1 m_1 - 1 j_2 m_2\\ &+ 1 | j_1 j_2 j m\rangle = 0. \qquad \text{(B.17)}\end{aligned}$$

这一组 α_J 的本征值方程只有在下述条件下才有解：

$$|j_1 - j_2| \leqslant j \leqslant j_1 + j_2, \qquad \text{(B.18)}$$

j 的每一个值出现一次，而且只出现一次．所得出的 CG 系数只能确定到一个总的相对周相．这样，CG 系数的完全确定需要添加一组周相约定．标准的选择是[1] CG 系数为实的且满足如下关系

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\langle j_1 - m_1 j_2 - m_2 | j_1 j_2 j - m\rangle, \qquad \text{(B.19 a)}$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\langle j_2 m_2 j_1 m_1 | j_2 j_1 j m\rangle, \qquad \text{(B.19 b)}$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = (-1)^{j_2+m_2}\left(\frac{2j+1}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}}\langle j_2 - m_2 j m | j_2 j j_1 m_1\rangle. \qquad \text{(B.19 c)}$$

---

1) A. R. Edmonds, 前引书, pp. 41—42.

有两个特殊的 CG 系数是很有用的[1]

$$\langle j_1 m_1 00 | j_1 0 j_1 m_1 \rangle = 1, \tag{B.20 a}$$

$$\langle j_1 m_1 j_1 - m_1 | j_1 j_1 00 \rangle = (-1)^{j_1 - m_1}(2j_1 + 1)^{-\frac{1}{2}}. \tag{B.20 b}$$

这些系数的较为对称的形式由 Wigner 的 3-j 记号给出

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \equiv (-1)^{j_1 - j_2 - m_3}(2j_3 + 1)^{-\frac{1}{2}} \times \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 - m_3 \rangle, \tag{B.21}$$

它具有如下性质

1. $m_1 + m_2 + m_3 = 0.$ (B.22 a)

2. $$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}.$$ (B.22 b)

3. 在列的偶数次对调下，3-j 系数保持不变.

4. 列的奇数次对调给出因子 $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3}$.

这些系数的大量表格可在文献中找到[2].

三个角动量的耦合：6-j 系数

考虑三个可对易的角动量（这里删去指标 j）. 将前两个角动量耦合起来组成一个确定的 j_{12}，再将 j_{12} 与 j_3 耦合组成 j，可以得出具有确定的总角动量的基

$$|(j_1 j_2) j_{12} j_3 j m\rangle = \sum_{m_1 m_2 m_3 m_{12}} |j_1 m_1 j_2 m_2 j_3 m_3\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_{12} m_{12}\rangle \times \langle j_{12} m_{12} j_3 m_3 | j_{12} j_3 j m\rangle, \tag{B.23}$$

或者先把第二个和第三个角动量耦合起来组成 j_{23}，然后再把

---

1) 注意，对于半整数的 j：$(-1)^{j-m} = (-1)^{m-j} = (-1)^{j+m}$.

2) M. Rotenberg, R. Bivens, N. Metropolis, and J. K. Wooten, Jr., "The 3-j and 6-j Symbols," The Technology Press, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Mass., 1959.

j_1 与 j_{23} 耦合起来组成 j，

$$|j_1(j_2j_3)j_{23}jm\rangle = \sum_{m_1m_2m_3m_{23}} |j_1m_1j_2m_2j_3m_3\rangle\langle j_2m_2j_3m_3|j_2j_3j_{23}m_{23}\rangle \times \langle j_1m_1j_{23}m_{23}|j_1j_{23}jm\rangle. \quad (B.24)$$

这两种方案中的每一个都给出一组完全的正交归一基，因为从基 $|j_1m_1j_2m_2j_3m_3\rangle$ 和 CG 系数的性质可推出

1. $$\langle(j_1j_2)j'_{12}j_3j'm'|(j_1j_2)j_{12}j_3jm\rangle = \delta_{j'_{12}j_{12}}\delta_{j'j}\delta_{m'm}, \quad (B.25a)$$

2. $$\sum_{j_{12}jm} |(j_1j_2)j_{12}j_3jm\rangle\langle(j_1j_2)j_{12}j_3jm| = \sum_{m_1m_2m_3} |j_1m_1j_2m_2j_3m_3\rangle\langle j_1m_1j_2m_2j_3m_3|, \quad (B.25b)$$

以及关于第二组基的类似关系式. 其结果是，从一组基到另一组基的变换，也是幺正的；6-j 记号就是用这些变换系数定义的.

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{j_1+j_2+j_3+j}}{[(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)]^{\frac{1}{2}}}\langle(j_1j_2)j_{12}j_3jm|j(j_2j_3)j_{23}jm\rangle$$

$$= \frac{(-1)^{j_1+j_2+j_3+j}}{[(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)]^{\frac{1}{2}}} \times \sum_{m_1m_2m_3m_{12}m_{23}} \langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_{12}m_{12}\rangle \times \langle j_{12}m_{12}j_3m_3|j_{12}j_3jm\rangle\langle j_2m_2j_3m_3|j_2j_3j_{23}m_{23}\rangle \times \langle j_1m_1j_{23}m_{23}|j_1j_{23}jm\rangle. \quad (B.26)$$

通过如下途径可以证明，这些变换系数与 m 无关. 考虑

$$|(j_1j_2)j_{12}j_3jm\rangle = \sum_{j_{23}} |j_1(j_2j_3)j_{23}jm\rangle \times \langle(j_1j_2)j_{12}j_3jm|j_1(j_2j_3)j_{23}jm\rangle. \quad (B.27)$$

用 $J_+/A(j_1, -m)$ 作用在这一方程的两边. 这将提高态的 m 值，而不改变系数，这些系数仍然具有指标 m. 但根据定义，

新态的展开系数具有指标 $m+1$，这样，系数应是与 m 无关的.

由定义可见 6-j 记号在下列情况下是不变的：(1) 将列任意对调 (2)在任意两列中交换上下宗量. 由方程 (B.23)到 (B.27) 得出的另一个有用的关系为

$$\sum_{j_{23}m_{23}}(-1)^{j_1+j_2+j_3+j}[(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)]^{\frac{1}{2}}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}$$
$$\times\langle j_1m_1j_{23}m_{23}|j_1j_{23}jm\rangle\langle j_2m_2j_3m_3|j_2j_3j_{23}m_{23}\rangle$$
$$=\sum_{m_{12}}\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_{12}m_{12}\rangle\langle j_{12}m_{12}j_3m_3|j_{12}j_3jm\rangle. \quad \text{(B.28)}$$

6-j 系数也大量地列成了表格[1].

不可约张量算符和 Wigner-Eckart 定理

秩数为 K 的不可约张量定义为 $2K+1$ 个算符 $T(KQ)$ 的集合 $[-K\leqslant Q\leqslant K]$，它们满足方程

$$\begin{cases}[J_\pm,T(KQ)]=A(K,\mp Q)T(K,Q\pm1),\\ [J_z,T(KQ)]=QT(KQ).\end{cases} \quad \text{(B.29)}$$

张量算符的例子(在一次量子化中)有：

1. $f(r)Y_{LM}(\theta,\varphi)$ $(-L\leqslant M\leqslant L)$：秩数为 L 的张量算符，

2. $r_q(-1\leqslant q\leqslant 1)$：秩数为 1 的张量算符，这里

$$r_{\pm1}=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(x\pm iy),\quad r_0=z.$$

3. $J_q(-1\leqslant q\leqslant 1)$：秩数为 1 的张量算符，这里

$$J_{\pm1}=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x\pm iJ_y),\quad J_0=J_z.$$

---

1) M.Rotenberg et al., 前引书.

$$\left[\text{注意 } J_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} J_{\pm}.\right]$$

现在介绍 Wigner-Eckart 定理，它说的是，一个不可约张量算符的矩阵元对 m 的依赖关系可以用 Clebsch-Gordan 系数显式地提取出来：

$$\langle \gamma' j' m' | T(KQ) | \gamma j m \rangle = (-1)^{K-j+j'} \frac{\langle KQjm | Kjj'm' \rangle}{(2j+1)^{\frac{1}{2}}} \langle \gamma' j' \| T_K \| \gamma j \rangle, \quad \text{(B.30)}$$

这里约化矩阵元 $\langle \gamma' j' \| T_K \| \gamma j \rangle$ 与 m 的值无关. 这一有力而且有用的定理可以证明如下：

1. 考虑

$$|\phi_{jm}\rangle \equiv \sum_{m_1 Q} \langle j_1 m_1 KQ | j_1 K j m \rangle T(KQ) | \gamma j_1 m_1 \rangle.$$

角动量和 $T(KQ)$ 之间的对易关系 (B.29)

$$\left[\text{利用 } \mathbf{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z J_z\right]$$

和定义 CG 系数的线性方程组 (B.17) 表明

$$\mathbf{J}^2 |\Psi_{jm}\rangle = j(j+1) |\Psi_{jm}\rangle,$$
$$J_z |\Psi_{jm}\rangle = m |\Psi_{jm}\rangle.$$

2. 因此，我们可以把 $|\phi_{jm}\rangle$ 按基矢 $|\gamma j m\rangle$ 展开，

$$|\Psi_{jm}\rangle = \sum_{\gamma''} \langle \gamma'' j m | \Psi_{jm} \rangle | \gamma'' j m \rangle,$$

像方程 (B.27) 后面所证明的，系数 $\langle \gamma'' j m | \Psi_{jm} \rangle$ 与 m 无关.

3. CG 系数的正交性意味着

$$T(KQ) | \gamma j_1 m_1 \rangle = \sum_{jm} \langle j_1 m_1 KQ | j_1 K j m \rangle | \Psi_{jm} \rangle.$$

4. 与 $\langle \gamma' j_2 m_2 |$ 的内积给出

$$\langle \gamma' j_2 m_2 | T(KQ) | \gamma j_1 m_1 \rangle = \langle j_1 m_1 KQ | j_1 K j_2 m_2 \rangle \langle \gamma' j_2 | \Psi_{j_2} \rangle.$$

这正是 Wigner-Eckart 定理，其中约化矩阵元是通过与 m 无关

的因子和符号而用 $\langle r'j_2|\phi_{j_2}\rangle$ 定义的.

耦合方案中的张量算符

考虑两个张量算符 $T(K_1Q_1)$ 和 $U(K_2Q_2)$，我们假定它们属于不同的粒子或不同的空间. 由定义方程 (B.29) 和定义 CG 系数的线性方程组 (B.17)，容易验证

$$X(KQ) \equiv \sum_{Q_1Q_2}\langle K_1Q_1K_2Q_2|K_1K_2KQ\rangle T(K_1Q_1)U(K_2Q_2) \quad \text{(B.31)}$$

又是一个秩数为 K 的不可约张量算符. 这个结果的一个特例是两个张量算符的标量积

$$\begin{aligned}(2K+1)^{\frac{1}{2}}(-1)^K X(0) &\equiv T(K)\cdot U(K)\\ &= \sum_Q (-1)^Q T(KQ)U(K-Q),\end{aligned} \quad \text{(B.32)}$$

它是秩数为零的张量算符，因而与 **J** 可对易. 通过插入态的完全集合，利用 Wigner-Eckart 定理，并利用 6-j 记号的定义，我们可以证明

$$\begin{aligned}&\langle r'j_1''j_2''j'm'|T(K)\cdot U(K)|rj_1j_2jm\rangle\\ &= (-1)^{j_1+j_2'+j}\delta_{jj'}\delta_{mm'}\begin{Bmatrix} j & j_2'' & j_1'' \\ K & j_1 & j_2\end{Bmatrix}\sum_{r''}\langle r'j_1''\|T(K)\|r''j_1\rangle\\ &\quad\times\langle r''j_2''\|U(K)\|rj_2\rangle.\end{aligned} \quad \text{(B.33)}$$

按完全同样的方式，单个算符在耦合方案中的矩阵元是

$$\begin{aligned}\langle r'j_1''j_2''j'\|T(K)\|rj_1j_2j\rangle &= (-1)^{j_1''+j_2+j+K}[(2j'+1)(2j+1)]^{\frac{1}{2}}\\ &\quad\times\begin{Bmatrix} j_1'' & j' & j_2 \\ j & j_1 & K\end{Bmatrix}\langle r'j_1''\|T(K)\|rj_1\rangle,\end{aligned} \quad \text{(B.34 a)}$$

$$\begin{aligned}&\langle r'j_1''j_2''j'\|U(K)\|rj_1j_2j\rangle\\ &\quad= (-1)^{j_1+j_2+j'+K}[(2j'+1)(2j+1)]^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

$$\times \begin{Bmatrix} j_2' & j' & j_1 \\ j & j_2 & K \end{Bmatrix} \langle \gamma' j_2' \| U(K) \| \gamma j_2 \rangle . \qquad \text{(B.34 b)}$$

在这些关系式中，$T(K)$ 和 $U(K)$ 分别作用于波函数的第一部分和第二部分。

一些物理量数值

$\hbar = h/2\pi$	$= 1.055\times10^{-27}$ 尔格·秒
c	$= 2.998\times10^{10}$ 厘米·秒$^{-1}$
k_B	$= 1.381\times10^{-16}$ 尔格·K^{-1}
m_e	$= 9.110\times10^{-28}$ 克
m_p	$= 1.673\times10^{-24}$ 克
m_p/m_e	$= 1836$
e	$= 4.803\times10^{-10}$ 静电单位
Avogadro 数	$=6.022\times10^{23}$ 摩尔$^{-1}$
$e^2/\hbar c = \alpha$	$= (137.0)^{-1}$
$\mu_B = e\hbar/2m_ec$	$= 9.274\times10^{-21}$ 尔格·高斯$^{-1}$
$\mu_N = e\hbar/2m_pc$	$= 5.051\times10^{-24}$ 尔格·高斯$^{-1}$
1里德伯 $= e^2/2a_0 = e^4m_e/2\hbar^2$	$= 13.61$ 电子伏
$a_0 = \hbar^2/m_ee^2$	$= 5.292\times10^{-9}$ 厘米
$\lambda_e = \hbar/m_ec$	$= 3.862\times10^{-11}$ 厘米
$\lambda_p = \hbar/m_pc$	$= 2.103\times10^{-14}$ 厘米
m_pc^2	$= 938.3$ 兆电子伏
$\varphi_0 = hc/2e$	$= 2.068\times10^{-7}$ 高斯·厘米^2
$\hbar c$	$= 197.3\times10^{-13}$ 兆电子伏·厘米
1 电子伏	$= 1.602\times10^{-12}$ 尔格

来源：本表汇自 B. N. Taylor, W. H. Parker and D. N. Langenberg, *Rev. Mod. Phys.*, **41**: 375 (1969).