第37卷 第6期 物 理 学 报 Vol. 37, No. 6
1988年6月 ACTA PHYSICA SINICA June, 1988

多体关联动力学中的自洽平均场*

王 顺 金
(中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理中心;兰州大学)

1987年1月15日收到

提 要

本文仔细地讨论了量子多体关联动力学中的广义自洽平均场，证明无论动态还是定态自洽平均场都是存在的. 多体关联通过两体关联 c_2 及其相应的碰撞项 I 进入平均场. I 的作用是双重的：对单粒子运动量子态的动力学效应和对单粒子态填充数的影响. 多体关联还在多体系统的能量表达式中表现出来，使得该表达式不同于通常的 HF-Brueckner 理论中的表达式.

一、引 言

平均场理论在量子力学多体问题中占有特殊重要的位置. 著名的 Hartree-Fock 自洽场理论在原子物理和原子核物理中已成为处理多体问题的出发点.自 Hartree-Fock 理论提出以来,自洽场理论有了很大的发展,其趋势是在自洽场中包括越来越多的剩余相互作用的贡献,同时把静态平均场推广到动态平均场[1-3].

通常有三种方式引进自洽的平均场. 其一是在微扰论框架内，以图形抵消法则引进平均场[4]. 其二是在 Green 函数理论框架内,通过单粒子 Green 函数的 Dyson 方程中的自能算子的各种近似引进平均场[5]. 最后,是在多体关联动力学的框架内,通过关联函数的截断近似引进自洽的平均场[6,7].前两种途径已众所周知,本文拟讨论第三条途径,即多体关联动力学中的自洽平均场.

近年来,对推广的 TDHF (ETDHF) 理论的研究[8]，促成了密度矩阵形式的多体关联动力学方程的建立[7].在不同的切断近似下,可以从多体关联的动力学方程得到 TDHF 和 HF, ETDHF 和 HF-Brückner 方程，以及 HF-Brückner-Faddev 方程. 多体关联动力学包含着 HF 和 TDHF 以及 Brückner 理论,意味着它可能包含广义的自洽场理论. 的确,现已查明 ETDHF 理论中存在着自洽的平均场[9,10]. 进一步的问题是，在多体关联动力学中,自洽的平均场是否一般地存在? 如果存在,它具有哪些新的特征? 本文将讨论和回答这些问题.

二、多体关联动力学

密度矩阵形式的多体关联动力学[7]的基本精神，是在 YBBGK 密度矩阵体系中[11,12]，

* 国家自然科学基金资助的课题.

分离出约化密度矩阵中的多体关联成分，然后把约化密度矩阵的运动方程组转化成为多体关联矩阵的运动方程组. 这些方程组描述多体关联矩阵随时间的演化，构成多体关联动力学的基本方程组.

设 ρ 是单体密度矩阵，ρ_n 是 n 体约化密度矩阵，$c_2, c_3, \cdots, c_n$ 是二体、三体、…n 体关联密度矩阵，ρ_n 与 c_n 由非线性变换联系起来

$$\rho_n = \underset{(n)}{AS} \sum_{p=1}^{n-1} \rho_{n-p} c_p + c_n \tag{1}$$

A, S 是反对称、对称化算子. 在上述变换下，约化密度矩阵的运动方程转化成多体关联的运动方程，

$$i\hbar\dot{\rho} = [h_0(1), \rho] + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}[v(1,2), \underset{(2)}{AS}(\rho\rho + c_2)], \tag{2a}$$

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_2 = {} & [h_0(1) + h_0(2) + v(1,2), c_2] + [v(1,2), A\rho\rho] \\ & + \underset{(3)}{\mathrm{Tr}}[v(1,3) + v(2,3), c_3] + \underset{(3)}{\mathrm{Tr}}[v(1,3) + v(2,3), \underset{(3)}{AS}(\rho\rho\rho + \rho c_2)]_L, \end{aligned} \tag{2b}$$

……

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_n = {} & \left[\sum_{i=1}^{n} h_0(i) + \sum_{j>i=1}^{n-1} v(i,j), c_n\right] + \underset{(n)}{AS} \sum_{p=1}^{n-1} \left[\sum_{j>i=1}^{n-1} v(i,j), \rho_{n-p} c_p\right]_L \\ & + \underset{(n+1)}{\mathrm{Tr}} \left[\sum_{i=1}^{n} v(i, n+1), c_{n+1}\right] + \sum_{p=1}^{n} \underset{(n+1)}{\mathrm{Tr}} \left[\sum_{i=1}^{n} v(i, n+1), \underset{(n+1)}{AS} \rho_{n-p+1} c_p\right]_L. \end{aligned} \tag{2c}$$

对于有限的 A 个粒子的体系，还应补充一个 c_A 的运动方程

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_A = {} & [H, c_A] + \underset{(A)}{AS} \sum_{p=1}^{A} \left[\sum_{j>i=1}^{A-1} v(i,j), \rho_{A-p} c_p\right]_L \\ & - \sum_{p=1}^{A-1} \underset{(A+1)}{\mathrm{Tr}} \left[\sum_{i=1}^{A} v(i, A+1), \underset{(A+1)}{AS} \rho_{A-p+1} c_p\right]_{\text{unlinked}} \end{aligned} \tag{2d}$$

或等价地

$$i\hbar\dot{c}_A = \left[H, \underset{(A)}{AS} \sum_{p=1}^{A-1} \rho_{A-p} c_p + c_A\right] - i\hbar \underset{(A)}{AS} \sum_{p=1}^{A-1} (\dot{\rho}_{A-p} c_p + \rho_{A-p} \dot{c}_p), \tag{2e}$$

其中 H 是 A 体系统的哈密顿量，h_0 是单体哈密顿量，$v(i,j)$ 是二体相互作用. $\underset{(n)}{A}$ 对变量 $(1', 2', \cdots, n')$ 实行反对称化运算，$\underset{(n)}{S}$ 对变量 $(1, 2, \cdots, n; 1', 2', \cdots, n')$ 实行对称化运算；但重复的项目应当去掉. $[\quad]_L$ 表示连接项(不能按变量分解因式的项目). $\underset{(n+1)}{\mathrm{Tr}}$ 表示对第 $n+1$ 个粒子的连续坐标积分，对不连续坐标求和.

关于非定态和定态多体关联动力学方程组的求解问题，将另文专门讨论.

三、多体关联动力学中的动态自洽平均场

在低阶切断近似下，多体关联动力学方程导致 TDHF 和 ETDHF 近似. TDHF 本身是最简单的动态平均场理论，而 ETDHF 已被证明存在着自洽的动态平均场[9,10]. 进

一步的问题自然是，在多体关联动力学中，是否一般地存在着动态的自洽平均场．答案并不是显然的，因为需要回答：1）多体关联能否进入平均场，并以怎样的方式进入平均场；2）能否把单体密度矩阵的运动方程变成类似于 TDHF 方程那样的确定单粒子运动状态的动力学方程以及伴随的方程；3）在这些自洽场方程组中，多体关联起什么作用．

幸运的是，ETDHF 的动态平均场的许多特点具有一般性，因此讨论 ETDHF 平均场的方法成为一般地讨论多体关联动力学中的动态平均场的很好响导．

我们假设多体关联动力学方程组的解，特别是 c_2 的解已经得到，然后讨论如何把 ρ 的运动方程变成自洽场理论中的运动方程组．我们下面的讨论与是否做切断近似无关，是普遍成立的．因为切断近似只是对 ρ、单粒子态及其填充数的解引入近似，并不改变自洽场方程组的形式．

为了方便，我们改写一下单体密度矩阵运动方程的形式，

$$i\hbar\dot{\rho} = [h, \rho] + i\hbar I, \tag{3}$$

其中

$$i\hbar I(x_1, x_1') = \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}[v(1, 2), c_2], \tag{4}$$

$$h\rho = h_0\rho + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, v(1, 2)A\rho(1)\rho(2). \tag{5}$$

设 $\phi_\alpha(x, t)$ 是 ρ 的本征函数，即

$$\int \rho(x, x', t)\phi_\alpha(x', t)dx' = n_\alpha\phi_\alpha(x, t) \tag{6}$$

或

$$\rho(x, x', t) = \sum_\alpha n_\alpha\phi_\alpha(x, t)\phi_\alpha^*(x', t). \tag{7}$$

把(7)式代入(3)式，得

$$\begin{aligned} i\hbar\sum_\alpha\Big\{&\dot{n}_\alpha\phi_\alpha(x, t)\phi_\alpha^*(x', t) + n_\alpha\Big(\dot{\phi}_\alpha(x, t) - \frac{1}{i\hbar}h(x)\phi_\alpha(x, t)\Big)\phi_\alpha^*(x', t) \\ &+ n_\alpha\phi_\alpha(x, t)\Big(\dot{\phi}_\alpha^*(x', t) + \frac{1}{i\hbar}h(x')\phi_\alpha^*(x', t)\Big)\Big\} \\ &= i\hbar\sum_{\alpha\beta} I_{\alpha\beta}(t)\phi_\alpha(x, t)\phi_\beta^*(x', t) \end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$I_{\alpha\beta}(t) = \int \phi_\alpha^*(x, t)I(x, x', t)\phi_\beta(x', t)dxdx'. \tag{9}$$

用 $\phi_\alpha^*(x, t)$ 和 $\phi_\alpha(x', t)$ 乘(8)式等号两边，并对 x, x' 积分，考虑到 ϕ_α 的正交归一性（由于 $\phi_\alpha(x, t)$ 是厄密算子 ρ 的本征函数，故构成正交归一函数系），

$$\langle\phi_\alpha|\phi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}, \tag{10}$$

可得

$$\dot{n}_\alpha = I_{\alpha\alpha}. \tag{11}$$

这是单粒子态 ϕ_α 的填充几率的时间演化方程．因此，n_α 随时间的演化由碰撞项 I 的

对角矩阵元 $I_{\alpha\alpha}$ 决定. 下面将看到, I 的非对角矩阵元将产生一个平均场的修正项. 以 $\phi_\alpha(x',t)$ 乘(8)式等号两边,对 x' 积分,得

$$i\hbar\left\{\dot{n}_\alpha\phi_\alpha(x,t)+n_\alpha\left(\dot{\phi}_\alpha(x,t)-\frac{1}{i\hbar}h(x)\phi_\alpha(x,t)\right)-\frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha'}\lambda_{\alpha\alpha'}n_{\alpha'}\phi_{\alpha'}(x,t)\right\}$$

$$=i\hbar\sum_{\alpha'}I_{\alpha'\alpha}\phi_{\alpha'}(x,t), \tag{12}$$

其中

$$\lambda_{\alpha'\alpha}(t)=-\int[i\hbar\dot{\phi}^*_\alpha(x,t)+h(x)\phi^*_\alpha(x,t)]\phi_{\alpha'}(x,t)dx. \tag{13}$$

以 $\phi^*_{\alpha'}(x,t)(\alpha'\neq\alpha)$ 乘(12)式等号两边并对 x 积分,考虑到

$$\lambda^*_{\alpha'\alpha}=\lambda_{\alpha\alpha'}$$

可得

$$(n_\alpha-n_{\alpha'})\lambda_{\alpha\alpha'}=i\hbar I_{\alpha'\alpha}\quad(\alpha\neq\alpha') \tag{14a}$$

或等价地

$$\lambda_{\alpha\alpha'}=i\hbar I_{\alpha'\alpha}/(n_\alpha-n_{\alpha'})\quad(\alpha\neq\alpha'). \tag{14b}$$

把(14a)式代入(12)式,并运用(11)式,得

$$i\hbar\frac{\partial\phi_\alpha(x,t)}{\partial t}-h(x)\phi_\alpha(x,t)=\sum_{\alpha'\neq\alpha}\lambda_{\alpha\alpha'}\phi_{\alpha'}(x,t)+\lambda_{\alpha\alpha}(t)\phi_\alpha(x,t). \tag{15}$$

定义 δh

$$\langle\phi_\alpha|\delta h|\phi_{\alpha'}\rangle=\begin{cases}i\hbar I_{\alpha\alpha'}/(n_{\alpha'}-n_\alpha) & \alpha\neq\alpha',\\ 0 & \alpha=\alpha'.\end{cases} \tag{16}$$

则(15)式可写成

$$i\hbar\frac{\partial\phi_\alpha(x,t)}{\delta t}-(h+\delta h)\phi_\alpha(x,t)=\lambda_{\alpha\alpha}(t)\phi_\alpha(x,t). \tag{17}$$

在时间有关的单粒子运动方程中,单粒子能量是不确定的,方程(17)中的 $\lambda_{\alpha\alpha}(t)$ 可以通过如下规范变换予以消除:

$$\phi_\alpha(x,t)=e^{-\frac{1}{i\hbar}\int^t_0\lambda_{\alpha\alpha}(\tau)d\tau}\tilde{\phi}_\alpha(x,t), \tag{18}$$

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\phi}_\alpha(x,t)}{\delta t}=(h+\delta h)\tilde{\phi}_\alpha(x,t). \tag{19}$$

因此,可以选 $\lambda_{\alpha\alpha}(t)\equiv0$, 事实上,只要在初始时刻选 $\lambda_{\alpha\alpha}(t_0)=0$, 则由(17)式和(16)式,用迭代法可以证明,由(13)式定义的 $\lambda_{\alpha\alpha}(t)\equiv0$. 设 $\lambda_{\alpha\alpha}(t_0)=0$, $t_1=t_0+\Delta t$, 由(17)式有

$$i\hbar\frac{\partial\phi_\alpha(x,t_1)}{\delta t_1}-(h+\delta h)\phi_\alpha(x,t_1)=0. \tag{20}$$

由上式及(13)和(16)式,可算得

$$\lambda_{\alpha\alpha}(t_1)=-\int\langle\phi_\alpha(x,t_1)|\delta h|\phi_\alpha(x,t_1)\rangle dx=0. \tag{21}$$

选 $\lambda_{\alpha\alpha}\equiv0$ 后,单粒子态运动方程(17)化为

$$i\hbar\frac{\delta\phi_\alpha(x,t)}{\delta t}-(h+\delta h)\phi_\alpha(x,t)=0. \tag{22}$$

因此，ρ 的运动方程分解为两个方程：单粒子态 $\phi_\alpha(x,t)$ 的动力学方程(22)和单粒子态填充数 n_α 的演化方程(11)．多体关联通过 c_2 和相应的碰撞项 I 进入平均场．I 的作用是双重的：1）非对角部分产生一个平均场修正 δh，进而影响单粒子运动状态 ϕ_α．这是动力学效应．2）对角部分决定单粒子填充数 n_α 随时间的演化规律，因而造成单粒子状态的统计分布及其变化．上述分析表明，一旦考虑了多体关联，不仅单粒子运动的平均场需要修正，而且单粒子态填充的不确定性也是不可避免的．这一结论无论对定态理论，还是非定态理论都是成立的．单粒子态因多体关联效应而产生统计分布这一点，虽然从观念上讲是十分合理的，因为多体关联本身就意味着单粒子运动状态的不确定性．然而这一结果，却为通常的广义自洽场理论(基于图形抵消原则的微扰论，而非 Green 函数体系下的自洽场理论，它原则上可以处理这一效应)所忽视，把包含多体关联效应的广义自洽场与独立粒子波函数不自然地结合起来，并由此计算能量及其它物理量．多体关联对单粒子量子态的动力学效应和对单粒子态填充分布的影响，均影响物理量(如能量)的计算．通常的 HF-Brückner-Faddeev 理论，[3,13,14]，只考虑到多体关联的动力学效应对能量的影响．这些问题，我们将在下面详细讨论．

作为多体关联动力学方程组的完整求解问题，应当把单体密度矩阵导致的自洽场方程与 c_n 的运动方程联立求解．这些方程是耦合的、非线性方程组，不仅 c_2 通过 I 进入自洽场方程组，而 ρ 也进入 c_n 的运动方程．具体求解时，自然可以做切断近似，但前述关于 ρ 的自洽场方程组的形式是不变的，即在切断近似下，多体关联动力学中的动态自洽场仍然存在．只要二体以上的多体关联存在，上面关于多体关联在单粒子运动层次上的动力学效应和统计效应的论述仍然是成立的．只有完全略去多体关联（$c_n=0, n\geqslant 2$），才有完全的独立粒子运动．这正是 TDHF 近似．

四、多体关联动力学中的定态自洽平均场

原则上，可以对上节的动态自洽场方程取定态极限，得到定态自洽场方程．在定态极限下，

$$\dot{\rho}=0,\quad \dot{c}_n=0. \tag{23}$$

令

$$\phi_\alpha(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_\alpha t}\phi_\alpha(x), \tag{24}$$

代入(7)，(11)，(22)式，得定态自洽场方程

$$(h+\delta h)\phi_\alpha(x)=\varepsilon_\alpha\phi_\alpha(x), \tag{25}$$

$$\dot{n}_\alpha=I_{\alpha\alpha}=0, \tag{26}$$

$$\rho(x,x')=\sum_\alpha n_\alpha\phi_\alpha(x)\phi_\alpha^*(x'). \tag{27}$$

上述方程(25)和(26)也可以从 ρ 的定态方程

$$[h,\rho]+i\hbar I=0 \tag{28}$$

直接得到. 在 ρ 的本征表象中,把(27)式代入(28)式, 用 $\phi_\alpha^*(x)$ 和 $\phi_{\alpha'}(x')$ 乘(28)式等号两边并对 x, x' 积分,得

$$\langle\phi_\alpha|[h,\rho]|\phi_\alpha\rangle = 0,\ I_{\alpha\alpha} = 0, \tag{29}$$

$$\langle\phi_\alpha|h|\phi_{\alpha'}\rangle n'_\alpha - n_\alpha\langle\phi_\alpha|h|\phi_{\alpha'}\rangle = -i\hbar I_{\alpha\alpha'} \qquad \alpha \neq \alpha'. \tag{30}$$

令 ϕ_α 是 $h + \delta\bar{h}$ 的本征函数,

$$(h + \delta\bar{h})\phi_\alpha = \bar{\varepsilon}_\alpha\phi_\alpha, \tag{31}$$

则

$$\langle\phi_\alpha|h|\phi_\alpha\rangle = -\langle\phi_\alpha|\delta\bar{h}|\phi_{\alpha'}\rangle, \tag{32}$$

代入(30)式得

$$\langle\phi_\alpha|\delta\bar{h}\rho - \rho\delta\bar{h}|\phi_{\alpha'}\rangle = i\hbar I_{\alpha\alpha'} \qquad (\alpha \neq \alpha') \tag{33}$$

或

$$\langle\phi_\alpha|\delta\bar{h}|\phi_{\alpha'}\rangle = i\hbar I_{\alpha\alpha'}/(n\alpha' - n\alpha) \qquad (\alpha \neq \alpha'). \tag{34}$$

与(16)式一致,故 $\delta\bar{h} = \delta h$, $\bar{\varepsilon}_\alpha = \varepsilon_\alpha$. 考虑到(29)和(33)式之后, ρ 的定态方程(28)可写成

$$[h + \delta h, \rho] = 0. \tag{35}$$

(35)式表明, $h + \delta h$ 与 ρ 对易,有共同本征解,故有

$$(h + \delta h)\phi_\alpha = \varepsilon_\alpha\phi_\alpha, \tag{25}$$

$$\rho\phi_\alpha = n_\alpha\phi_\alpha \tag{36}$$

$$\rho(x, x') = \sum_\alpha n_\alpha\phi_\alpha(x)\varphi_\alpha^*(x'). \tag{27}$$

考虑到(29)式,

$$\dot{n}_\alpha = I_{\alpha\alpha} = 0 \tag{26}$$

后,我们又重新得到定态自洽场方程组(25)—(27). 在这组方程中, δh 保持着与动态自洽场修正一致的定义,而 δh 的对角项是取作零的,在动态自洽场中,$\langle\phi_\alpha|\delta h|\phi_\alpha\rangle$相应于单粒子能量的一个移动,可以通过规范变换予以消除,因此选 $\lambda_{\alpha\alpha} = 0$,$\langle\alpha|\delta h|\alpha\rangle = 0$. 在定态平均场中, ϕ_α 的本征方程允许 δh 的对角项和单粒子能量 ε_α 有一移动,即

$$(h + \delta h + \Delta\varepsilon_\alpha)\phi_\alpha = (\varepsilon_\alpha + \Delta\varepsilon_\alpha)\phi_\alpha. \tag{37}$$

这使得我们可以利用定态方程中

$$I_{\alpha\alpha} = 0$$

这一条件,修正 δh 的定义,令

$$\delta h\rho = \mathop{\mathrm{Tr}}_{(2)} v(12)c_2. \tag{38}$$

这一定义自然导致

$$I_{\alpha\alpha} = 0$$

及

$$\langle\phi_\alpha|\delta h\rho - \rho\delta h|\phi_{\alpha'}\rangle = i\hbar I_{\alpha\alpha'}.$$

因此(38)式与(33)式是一致的. 但(38)式额外给出了 δh 对角项的定义

$$\langle\phi_\alpha|\delta h\rho|\phi_\alpha\rangle = n_\alpha\langle\phi_\alpha|\delta h|\phi_\alpha\rangle = \langle\phi_\alpha|\mathop{\mathrm{Tr}}_{(2)} v(12)c_2|\phi_\alpha\rangle. \tag{39}$$

这显然是(37)式所允许的. 然而,对动态自洽场，由于 $\dot{n}_\alpha = I_{\alpha\alpha} \neq 0$，用(38)式定义 δh 是不允许的. 幸好那里出现的 δh 的对角元素的不确定性可以通过选取 $\lambda_{\alpha\alpha}(x) = 0$ 予以消除. 以后,我们以(38)式作为定态自洽场修正项 δh 的定义.顺便指出,这种定义使得定态的能量表达式变得整齐干净. 我们将在下一节说明这一问题.

值得注意的是,动态自洽场方程与定态自洽场方程的区别. 这一区别在动态和定态多体关联动力学方程中就包含着. 动态多体关联动力学方程的求解是初值问题，而定态多体关联动力学方程的求解包含本征值问题. 这一问题的一般性讨论将在另文中给出. 这是只指出这种区别对于自洽场方程求解问题造成的后果. 对于动态自洽场方程，只要给定了初始时刻的 ρ，c_n 值,以后任何时刻的自洽场方程的解就完全确定. 对于定态自洽场方程,由于 $\dot{n}_\alpha = I_{\alpha\alpha} = 0$，$n_\alpha =$ 常数，其具体数值不能从自洽场方程求得. 这种情况,在 A 体密度矩阵的定态诺意曼方程中就存在着

$$[\rho_A, H] = 0, \tag{40}$$

其解

$$\rho_A(12\cdots A;\ 1'2'\cdots A') = \sum_n w_n \Psi_n(12\cdots A)\Psi_n^*(1'2'\cdots A'), \tag{41}$$

其中 $\Psi_n(12\cdots A)$ 可由本征方程

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n \tag{42}$$

解得,而几率分布 W_n 却不能由诺意曼方程本身求得,必须从外部给定. 诺意曼定态方程解的不确定性在约化密度矩阵的定态 YBBGK 方程组中以另一种形式存在着. 而在定态的多体关联动力学方程组中,由非线性而造成新的不确定性. 现在已经知道,在切断近似下,约化条件

$$\rho_n = \frac{1}{(A-n)} \operatorname*{Tr}_{(n+1)} \rho_{n+1} \tag{43}$$

可以消除部分的不确定性,而方程的解仍然是多值的,这相当于本征值中的各种可能的激发态.

现在我们指出，n_α 的不确定性,可以通过约化条件用 c_2 的信息加以部分消除. 因

$$\rho_2 = A\rho\rho + c_2, \tag{44}$$

故

$$\rho = \frac{1}{(A-1)}\{\operatorname*{Tr}_{(2)} A\rho(1)\rho(2) + \operatorname*{Tr}_{(2)} c_2(12)\}. \tag{45}$$

在 ρ 的本征表象中,

$$\rho(1,1') = \sum_\alpha n_\alpha \phi_\alpha(1)\phi_\alpha^*(1'), \tag{46}$$

$$c_2(12,1'2') = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha\beta,\gamma\delta}\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2)\phi_\gamma^*(1')\phi_\delta^*(2'). \tag{47}$$

把(46),(47)式代入(45)式得

$$(A-1)\sum_\alpha n_\alpha\phi_\alpha(1)\phi_\alpha^*(1') = \sum_\alpha An_\alpha\phi_\alpha(1)\phi_\alpha^*(1') - n_\alpha^2\phi_\alpha(1)\phi_\alpha^*(1')$$

$$+\sum_{\alpha\beta\gamma} c_{\alpha\beta,\gamma\beta}\phi_\alpha(1)\phi_\gamma^*(1'),$$

$$\sum_{\alpha}(n_\alpha^2-n_\alpha)\phi_\alpha(1)\phi_\alpha^*(1')-\sum_{\alpha\beta\gamma} c_{\alpha\beta,\gamma\beta}\phi_\alpha(1)\phi_\gamma^*(1')=0. \tag{48}$$

考虑到 ϕ_α 的正交性,必有

$$n_\alpha^2-n_\alpha-\sum_{\beta} c_{\alpha\beta,\alpha\beta}=0, \tag{49}$$

$$\sum_{\beta} c_{\alpha\beta,\gamma\beta}=c_{\alpha\beta,\alpha\beta}\delta_{\alpha\gamma}. \tag{50}$$

令

$$\sum_{\beta} c_{\alpha\beta,\alpha\beta}=c_\alpha, \tag{51}$$

就得

$$n_\alpha=\frac{1}{2}\{1\pm\sqrt{1+4c_\alpha}\}. \tag{52}$$

因

$$n_\alpha^2\leqslant n_\alpha, \tag{53}$$

故

$$c_\alpha\leqslant 0. \tag{54}$$

因此,从二体关联 c_2 的矩阵元,可以计算 n_α 的值,但由于方程(45)和(49)的非线性,即使 c_α 给定,n_α 仍有多值性. 这种多值性的物理意义在 $c_\alpha=0$ 时尤为明确

$$n_\alpha=\frac{1}{2}\{1\pm1\}=1\ 或\ 0\quad(c_\alpha=0). \tag{55}$$

$\{n_{\alpha1}n_{\alpha2}\cdots n_{\alpha A}\}$ 的各种可能的取值方式,正给出独立粒子近似下多体系统的各种可能的激发态. 因此,n_α 的多值性与本征值问题中的各种可能的激发态相对应. (52)与(55)式还清楚地表明,只有当二体关联 $c_2\equiv0$ (因而也是多体关联必须恒等于零. 因为任何高阶多体关联的存在都意味着二体关联的存在),才有完全的独立粒子状态. 多体关联的存在 $(c_2\neq0)$,必然使单粒子态填充数 n_α 发生偏离于独立粒子近似的分布,在单粒子运动状态这一层次上,造成统计性.

五、多体关联动力学中的能量表达式

对于二体相互作用,H 是二元型物理量,系统的能量为

$$E=\langle H\rangle=\mathrm{Tr}\,h_0\rho+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,v(12)\rho_2=\mathrm{Tr}\,h_0\rho+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,v(12)(A\rho\rho+c_2)$$

$$=\mathrm{Tr}\,h\rho+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,v(c_2-A\rho\rho). \tag{56}$$

对于非定态,我们知道切断近似仍保持能量 E 守恒,对定态情形,能量表达式可以进一步

简化，注意到 $\delta h\rho = \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, vc_2$，

$$E = \mathrm{Tr}(h+\delta h)\rho - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\, v(A\rho\rho + c_2)$$

$$= \mathrm{Tr}(h+\delta h)\rho - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\, v\rho_2. \tag{57}$$

设

$$v\rho_2 = GA\rho\rho, \tag{58}$$

则

$$E = \mathrm{Tr}(h+\delta h)\rho - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\, GA\rho\rho \tag{59}$$

$$= \mathrm{Tr}\, h(G)\rho - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\, GA\rho\rho, \tag{60}$$

其中

$$h(G)\rho = h_0\rho + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, GA\rho\rho, \tag{61}$$

比较(59)和(60)式知

$$h + \delta h = h[G]. \tag{62}$$

实际上，从 $(h+\delta h)$ 和 $h[G]$ 的定义，也可证明(62)式的正确性，

$$(h+\delta h)\rho = h_0\rho + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, vA\rho\rho + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, vc_2 = h_0\rho + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, v\rho_2,$$

$$h[G]\rho = h_0\rho + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, GA\rho\rho = h_0\rho + \underset{(2)}{\mathrm{Tr}}\, v\rho_2.$$

考虑到 ρ 和 ρ_2 的任意性，故有

$$h + \delta h = h[G].$$

G 矩阵应从 c_2 的定态运动方程计算. 如果在 c_2 的方程中略去所有三体关联，则 G 满足 Bethe-Goldstone 方程. 这时，(60)式形式上与 Bethe-Goldstone-Brückner 理论的表达式一致，但有重要的差别：这里的 ρ 不是独立粒子近似下的 ρ，而是考虑了多体关联以后的 ρ. 在 $h[G]$ 和 ρ 的共同本征表象中

$$E = \sum_{\alpha} \varepsilon_\alpha n_\alpha - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\langle\alpha\beta|G|\alpha\beta - \beta\alpha\rangle n_\alpha n_\beta, \tag{63}$$

其中 n_α 偏离尖锐的费密球分布.

(61)和(63)式表明，在多体关联动力学中，自洽的平均场是存在的，但它不是由相互作用 v 确定，而是用广义 G 矩阵确定，体系的能量表达式也与 HF 理论的类似. 重要的区别在于：以 G 矩阵代替 v，以考虑多体关联效应后的 ρ 代替独立粒子近似下的 ρ. G 服从 c_2 的定态运动方程，多体关联通过该方程影响 G，进而影响自洽场中单粒子能量 $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\alpha[G]$ 和系统的总能量 $E = E[G]$.

六、讨论与结论

从前面几节中的结果，我们可以做出以下结论：

1. 在多体关联动力学的框架内，无论是定态问题，还是非定态问题，都可以引进自洽的平均场. 具体地说，单体密度矩阵的运动方程可以化成关于单粒子态的自洽场方程组，其中之一是决定单粒子量子状态的、类似 TDHF（或 HF）的运动方程，其中的自洽场包含多体关联的修正. 另一方程是决定单粒子态填充几率随时间演化的方程. 与 TDHF 不同，多体关联效应要改变单粒子态的分布，使其偏离独立粒子近似下的分布. 总之，在多体关联动力学中，自洽的平均场是普遍存在的，自洽的平均场可以包含多体关联效应.

2. 多体关联以特定的方式进入自洽场并影响单粒子运动. 任何多体关联都必须通过二体关联进入自洽场并影响单粒子运动（本文的讨论限于二体相互作用）. c_2 及其导致的碰撞项 I 对单粒子运动的影响具有双重效应：1) I 的非对角部分产生一个自洽场修正项进而影响单粒子运动状态，这是动力学效应；2) I 的对角部分决定单粒子态填充数随时间的演化规律，从而改变单粒子态的分布，使其偏离独立粒子近似下的分布. 因而在单粒子运动这一层次上产生一个统计分布；3) 在定态情形，$\mathrm{Tr}_{(2)} vc_2$ 直接与自洽场修正相联系，而 c_2 直接决定单粒子填充数 n_α. 总之，多体关联动力学直接揭示出多体关联对单粒子量子态的动力学（平均场）效应与对单粒子态填充分布的影响，这是我们的主要结论. 这一结果，或许具有更深的含义，它告诉我们，存在相互作用的多体系统，由于多体关联（相互作用的表现或后果），必然在单粒子运动的层次上造成一种统计分布. 在高一层次（复杂层次、如集团结构和集体运动）上的多体关联结构与低一层次（简单层次，如单粒子层次）上的统计分布，是可以并行不悖的. 同时，在低一层次（如单粒子层次）上的统计效应与集体平均场效应也是并行不悖的. 对于相互作用的多体系统的任何子系统而言，动力学的因果行为与机遇性的统计行为总是并存的，只有当统计不确定性很小因而可以不计时（如多体系统基态，费密海中的深层粒子态），才有近乎纯粹的决定论运动.

3. 与通常广义平均场理论的主要区别，是多体关联动力学中的平均场理论预言的单体密度矩阵具有偏离于独立粒子近似的单粒子态统计分布，这一结果会影响体系能量的计算. 与通常的广义自洽场理论相比，能量表达式中出现了异于独立粒子分布的单粒子填充数. 这是多体关联效应在体系能量计算中的表现. 这一效应应当在多体系统如核物质和有限核基态能量的数值结果中表现出来，这是一个有兴趣的值得探讨的课题.

最后关于广义自洽场理论的其它途径的现状. 就我们所知，Green 函数途径，可以以单粒子 Green 函数，单粒子自能和顶角函数的形式，在一定图形近似下写出三者之间相互耦合的自洽场方程（耦合的 Dyson 方程），但是只是在 HF 近似下才实现了，把 Green 函数的自洽场方程变成单粒子运动的 TDHF 方程. 在更进一步的（如梯形）近似下，我们尚没有见到包含单粒子运动方程在内的完整的自洽场方程.

基于微扰论级数重排列求和规则和抵消原则的广义自洽场理论，自 Bethe, Goldstone, Brüchner 和 Faddeev 等人之后有了较大的发展，而且在数值计算上取得了重要的成就. 这一理论，一方面把越来越多的多体关联图形的贡献包括到平均场中，另一方面却保持体系波函数的独立粒子近似. 这就形成了观念上的矛盾现象. 出现这种现象的原因是，自洽过程是按照工作规则建立起来的，而不是按照对于包括单粒子运动方程在内的严格的动力学方程组做自洽性近似后形成的. 与此相反，Green 函数途径和密度矩阵形式的多体关联动力学途径，其自洽场近似却是对动力学方程组进行的，自洽场与单粒子 Green 函

数和单粒子密度矩阵之间有着内在的自洽联系，不允许从外部对它们分别加以额外的规定。对于 Green 函数途径下的广义自洽场理论的研究，对于微扰论途径下自洽场与波函数之间的内在自洽性处理，以及对于三种广义自洽场理论的联系的探讨，均是十分有趣的研究课题。

参 考 文 献

[1] J. W. Negele, *Rev. Mod. Phys.*, 54(1982), 913.

[2] "Time-Dependent Hartree-Fock and Beyond", Lecture Notes in Physics, No. 171, edited by K. Goeke and P. G. Reinhard, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg/New York, (1982).

[3] B. D. Day, *Rev. Mod. Phys.*, **50**(1978), 495.

[4] Theory of The Many-Body Problem (Selected papers); 吴式枢，高能物理与核物理，**2** (1978)10.

[5] A. L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle System, McGraw-Hill, New York, (1971).

[6] M. Kümmel, K. H. Lührmann and J. G. Zabolitzky, *Phys. Rep.*, **C36**(1978), 1; J. Arponen, *Ann. Phys.* (*N. Y.*), **151**(1983), 311.

[7] Wang Shun-jin and W. Cassing, *Ann. Phys.* (*N. Y*), **159**(1985), 328.

[8] C. Y. Wong and H. K. Tang, *Phys. Rev. Lett.*, **40** (1978), 1070; *Phys. Rev.*, **C20**(1979), 1419.

[9] Wang Shun-jin, *Phys. Lett.*, **B133** (1983), 27.

[10] Wang Shun-jin, *Commun. Theor. Phys.* (*Beijing, China*), **4** (1985), 827.

[11] W. C. Schieve, in "Lecture Notes in Physics No. 28", W. C. Schieve and J. S. Turner, Eds, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg/New York, (1974).

[12] A. I. Akhiezer and S. V. Peletminskii, Methods of Statistical Physics, Pergamon, New York, (1981).

[13] R. Rajaraman and H. A. Bethe *Rev. Mod. Phys.*, **39** (1967), 745; H. A. Bethe, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **21**(1971), 93.

[14] C. Mahaux, *Nucl. Phys.*, **A328** (1979), 24.

SELF-CONSISTENT MEAN FIELD IN MANY-BODY CORRELATION DYNAMICS

WANG SHUN-JIN

(Center of Theoretical Physics, CCAST (World Laboratory); Lanzhou University)

ABSTRACT

The self-consistent mean field in the many-body correlation dynamics is discussed in detail. It is shown that the self-consistent mean field exists in general in many-body correlation dynamics for both stationary and non-stationary cases. The many-body correlations enter the mean field through the two-body correlation c_2 and the corresponding collision term I. The role played by I is twofold i.e., dynamical effects and statistical effects on single particle states. The many-body correlations also manifest their effects on the many-body energy and yield an energy expression different from the conventional expression in the HF-Brückner theory.