Письма в ЖЭТФ, том 38, вып. 11, стр. 550 – 553 *10 декабря 1983 г.*

ШТУРМОВСКИЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ФУНКЦИЙ ГРИНА В ТЕОРИИ МНОГОФЕРМИОННЫХ СИСТЕМ

А.И.Шерстюк

Предложены спектральные представления одно- и двухчастичных функций Грина не содержащие интегрирования по промежуточным состояниям непрерывного спектра.

В задаче на возмущение связанных состояний многочастичных систем существенную трудность представляет проблема учета промежуточных состояний непрерывного спектра [1, 2]. Принципиально новую возможность решения указанной проблемы открывает обобщение метода штурмовских разложений [3] на случай многофермионных систем. Покажем, что в случае конечных ферми-систем одно- и двухчастичные функции Грина могут быть представлены в виде разложений по полной системе функций чисто дискретного спектра.

Полная система собственных функций $\{u_k\}$ одноэлектронного хартри-фоковского оператора h,

$$(h - \epsilon_k) u_k = 0 \qquad (1)$$

содержит, как известно, функции непрерывного спектра, относящиеся к незанятым состоя-

ниям. Вместо $\{u_k\}$ рассмотрим систему функций $\{\phi_\nu\}$, удовлетворяющих обобщенному уравнению на собственные значения

$$(h-\epsilon)\,\phi_\nu = \lambda_\nu g\,\phi_\nu\,, \tag{2}$$

причем

$$<\phi_\nu\,|g\,|\,\phi_{\nu'}> = \delta_{\nu\nu'}, \qquad g\sum_\nu |\phi_\nu><\phi_\nu| = 1. \tag{3}$$

Самосопряженный положительно определенный оператор g может быть выбран таким образом, чтобы спектр собственных значений $\lambda_\nu = \lambda_\nu(\epsilon)$ уравнения (2) при $\epsilon < 0$ был чисто дискретным [3]. Введем операторы рождения „квазичастицы", α_ν^+ и β_ν^+ в состояниях ϕ_ν и $g\,\phi_\nu$ соответственно, такие, что отличные от нуля антикоммутационные соотношения имеют вид

$$\{\alpha_\nu\ \beta_{\nu'}^+\} = \delta_{\nu\nu'}\,;\ \}\ \{\alpha_\nu, \alpha_{\nu'}^+\} = <\phi_\nu\,|\,\phi_{\nu'}>;\ \ \{\beta_\nu, \beta_{\nu'}^+\} = <\phi_\nu\,|g^2|\,\phi_{\nu'}>. \tag{4}$$

С учетом условия полноты (3) полевые операторы можно представить в виде

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_\nu \phi_\nu(\mathbf{x})\,\beta_\nu = \sum_\nu g(\mathbf{x})\ \phi_\nu(\mathbf{x})\,\alpha_\nu\,, \tag{5}$$

причем как обычно

$$\{\Psi(\mathbf{x}),\ \Psi^+(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,.$$

Пользуясь (5), непосредственно получаем разложение одночастичной функции Грина

$$G^{(+)}(\mathbf{x}, t;\ \mathbf{x}',\ 0) = \sum_{\nu_1\nu_2} \phi_{\nu_1}(\mathbf{x})\,G^{(+)}_{\nu_1\nu_2}(t)\,\phi^*_{\nu_2}(\mathbf{x}'), \tag{6}$$

где

$$G^{(+)}_{\nu_1\nu_2}(t) = -\,i<\Phi|\,\beta_{\nu_1}\,e^{-\,i(H-E)t'}\beta^+_{\nu_2}\,|\Phi>\,.$$

В приближении Хартри – Фока

$$H = H_0 \equiv \sum_k a_k^+ a_k\,h_{kk}\,;\ \ |\Phi> = |\Phi_0> \equiv \prod_{n=1}^{N} a^+_{k_n}\,|0>\,,$$

где N – полное число частиц. В этом случае имеем

$$G^{(+)}_{\nu_1\nu_2}(t) = P_N <\phi_{\nu_1}\,|g\,e^{-iht}g|\,\phi_{\nu_2}> P_N, \tag{7}$$

где P_N – проектор на подпространство, ортогональное всем занятым в $|\Phi_0>$ состояниям. Фурье-образ функции (7) с учетом (2) запишется в виде

$$G^{(+)}_{\nu_1\nu_2}(\epsilon) \equiv \lim_{\delta\to 0} \int_0^\infty e^{i\tilde{\epsilon}t}\,G^{(+)}_{\nu_1\nu_2}(t)\,dt = -P_N\,\frac{\delta_{\nu_1\nu_2}}{\lambda_{\nu_1}(\epsilon)}\,, \tag{8}$$

где $\tilde{\epsilon} = \epsilon + i\delta$. Из выражения (8) видно, что независящий от времени гриновский оператор $G^{(+)}(\epsilon)$ диагонален в пространстве функций $\{\phi_\nu\}$ (в то время как оператор h, вообще говоря, не является диагональным). В этом смысле система $\{\phi_\nu\}$ (наряду с $\{u_k\}$) представляет собой выделенную систему функций.

При $\epsilon < 0$ в x – представлении имеем

$$G^{(+)}(\mathrm{x}, \mathrm{x}'; \epsilon) = \sum_{\nu} \widetilde{\phi}_{\nu}(\mathrm{x}) \widetilde{\phi}_{\nu}^{*}(\mathrm{x}')[\lambda_{\nu}(\epsilon)]^{-1}, \tag{9}$$

где $\widetilde{\phi}_{\nu}(\mathrm{x}) \equiv P_N \phi_{\nu}(\mathrm{x})$. Таким образом, одночастичная функция Грина всегда может быть представлена в виде разложения по полной системе квадратично интегрируемых функций спектра.

В ряде важных для приложений случаев двухчастичная функция Грина также может быть представлена в форме диагональной в базисе функций $\{\phi_{\nu}\}$ и не содержащей интегрирования по непрерывному спектру. Так, при вычислении отклика системы на внешнее возмущение и коллективных колебаний требуется определить частично-дырочную функцию Грина [4]. Фурье-образ запаздывающей частично-дырочной функции Грина с учетом разложения (9) может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(+)}(\mathrm{x}_1, \mathrm{x}_1'; \mathrm{x}_2, \mathrm{x}_2'; \omega) = \sum_{k \leqslant F} \sum_{\nu} \{ & u_k^*(\mathrm{x}_1') \widetilde{\phi}_{\nu}^{(-)}(\mathrm{x}_1) \widetilde{\phi}_{\nu}^{(-)*}(\mathrm{x}_2') u_k(\mathrm{x}_2) \times \\ & \times [\lambda_{\nu}(\epsilon_k + \omega)]^{-1} + u_k^*(\mathrm{x}_2') \widetilde{\phi}_{\nu}^{(+)}(\mathrm{x}_2) \widetilde{\phi}_{\nu}^{(+)*}(\mathrm{x}_1') u_k(\mathrm{x}_1)[\lambda_{\nu}(\epsilon_k - \omega)]^{-1} \}, \end{aligned} \tag{10}$$

где функции $\phi_{\nu}^{(\pm)}(\mathrm{x})$ удовлетворяют уравнениям

$$(h - \epsilon_k \pm \omega) \phi_{\nu}^{(\pm)}(\mathrm{x}) = \lambda_{\nu}(\epsilon_k \mp \omega) g(\mathrm{x}) \phi_{\nu}^{(\pm)}(\mathrm{x}). \tag{11}$$

Выражение (10) может быть также непосредственно использовано при расчете параметров взаимодействия системы с внешним полем с учетом корреляций в приближении случайных фаз. В символической записи функция Грина в этом приближении выражается через функцию $\mathcal{G}^{(+)}(\omega)$ посредством соотношения

$$G^{RPA}(\omega) = \mathcal{G}^{(+)}(\omega)[1 + \frac{\delta V_{HF}}{\delta \rho} \mathcal{G}^{(+)}(\omega)]^{-1}, \tag{12}$$

где V_{HF} – одночастичный хартри-фоковский потенциал (с учетом обмена), ρ – матрица плотности. Например, поляризуемость α-системы с учетом корреляций в этом приближении запишется в виде

$$\alpha \doteq -\mathrm{Sp}(dG^{RPA}d), \tag{13}$$

где d – одночастичный возмущающий оператор.

В общем случае при расчете высших порядков теории возмущений в развитом подходе может быть использована обычная диаграммная техника теории многих тел, причем при вычислении вклада диаграмм с одной квазичастичной и произвольным числом дырочных линий между любыми двумя вершинами интегрирование по непрерывному спектру исключается полностью.

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность М.Я.Амусья, В.С.Попову и И.С.Шапиро за обсуждение работы и полезные замечания.

Литература

1. *Yonger S.M.* Phys. Rev., 1980, **A21**, 1364; *Kelly H.P.* Adv. Theor. Phys., 1968, **2**, 75.
2. *Rotenberg M.* Adv. Atom. and Molec. Phys., 1970, **6**, 233.

3. *Груздев П.Ф., Шерстюк А.И.* Изв. АН СССР, сер. физ., 1977, **41**, 2477.
4. *Таулес Д.* Квантовая механика систем многих частиц. М.: Мир, 1975.

Государственный
оптический институт
им. С.И.Вавилова

Поступила в редакцию
27 октября 1983 г.