В.І. ВАСЬКІВСЬКИЙ

Департамент прикладної фізики, Технічний університет – Софія
(Бул. Климент Охридски, 8, Софія 1000, Болгарія ; e-mail: socyst@yandex.ru)

УДК 538.94

КОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ КУЛОНІВСЬКОЇ ПАРИ

Вперше публікуються результати, що отримані прямим алгебраїчним методом, для кореляційних функцій двох частинок із кулонівською взаємодією. Ефективність цього методу продемонстрована знаходженням в другому порядку майже всіх невідомих матричних елементів матриць розкладання.

К л ю ч о в і с л о в а: вторинне квантування, кулонівське спарювання, кореляційні функції.

1. Вступ. Прямий алгебраїчний метод знаходження кореляційних функцій

Метою цієї статті є покладання основ для точної теорії кулонівської пари, тобто пари вільних частинок, що підлягають електростатичній взаємодії. Важливо мати на увазі, що спарювання частинок є чисто квантовим ефектом, описання якого вимагає розробки точних методів розв'язання відповідних рівнянь руху для операторів народження та знищення кожної частинки, які є нелінійними. Найпростіший вигляд нелінійна складова таких рівнянь – лише один нелінійний оператор – має саме для випадку системи двох частинок, яка вибрана для того, щоб уникнути зайвих ускладнень при розв'язанні системи отриманих рівнянь. Ми будемо розглядати модифікацію прямого алгебраїчного методу знаходження кореляційних функцій (ПАМ), запропонованого в [1]. Нагадаємо, що в основі цього методу – ідея розкладання рівнянь для операторів в певному операторному базисі, який вибирається з врахуванням специфіки задачі, що розглядається. Будемо розглядати найпростіший випадок розкладання в двооператорному базисі. Після отримання за допомогою матриць розкладання $\hat{K}$ та $\hat{K}^+$ рівнянь для самих операторів та їхніх комутаторів чи антикомутаторів, ми перейдемо до аналізу основних співвідношень для кореляційних функцій, які несуть основне навантаження в техніці реалізації прямого алгебраїчного методу знаходження кореляційних функцій. Для цього ми розглянемо два вида розкладань для середніх значень операторів з допомогою матриць $\hat{F}$, $\hat{F}^+$ та $\hat{G}$, $\hat{G}^+$, матричні елементи яких будуть знайдені внаслідок розв'язання отриманих рівнянь. Метод ПАМ є точним, бо дає можливість здійснити ефективну лінеалізацію всіх рівнянь для операторів і, внаслідок цього, перейти від рівнянь для операторів до системи алгебраїчних рівнянь для невідомих елементів відповідних матриць розкладання. Ці рівняння можуть бути розв'язані точно, і, таким чином, можна знайти точні вирази для кореляційних функцій в залежності від параметрів гамільтоніана фізичної системи, що розглядається. В цій статті вперше публікуються результати, отримані методом ПАМ.

2. Рівняння для операторів

Розглянемо модифікацію прямого алгебраїчного методу знаходження кореляційних функцій, запропонованого в [1]. Для цього використовуються рівняння руху для операторів народження та знищення. Далі розглядатимемо систему, яка складається з двох частинок, що взаємодіють електростатично. Гамільтоніан цієї системи в представленні вторинного квантування [2] матиме такий вигляд:

$$H = H_1 + H_2 + H_{12}, \tag{1}$$

де

$$H_i = \sum_p \varepsilon_{ip} a^+_{ip} a_{ip}$$

– гамільтоніан вільної частинки сорту i, а

$$H_{12} = \sum_{p_1+p_2=p'_1+p'_2} U_{p'_1 p'_2 p_2 p_1} a^+_{1p'_1} a^+_{2p'_2} a_{2p_2} a_{1p_1}$$

– гамільтоніан взаємодії. Тут ε_{ip} – кінетична енергія, a^+_{ip} – оператори народження та a_{ip} – оператори знищення, $p = (s_z, \mathbf{p})$, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ – індекси, що позначають проекцію спіну та імпульс частинок. $U_{p'_1 p'_2 p_2 p_1}$ – потенціальна енергія взаємодії в імпульсному представленні. Будемо вважати, що обидві частинки є ферміонами, для яких виконуються такі співвідношення антикомутації (δ_{pq} – символ Кронекера):

$$a^+_{ip} a_{iq} + a_{iq} a^+_{ip} = \delta_{pq}, \tag{2}$$

$$a_{ip} a_{iq} + a_{iq} a_{ip} = 0, \tag{3}$$

$$a^+_{ip} a^+_{iq} + a^+_{iq} a^+_{ip} = 0. \tag{4}$$

З гамільтоніана отримаємо такі рівняння руху, які є в основі методу:

$$[a_{jq}, H] = K^{(j)}_{11q} a_{jq} + K^{(j)}_{12q} b_{jq}, \tag{5}$$

$$[b_{jq}, H] = K^{(j)}_{21q} a_{jq} + K^{(j)}_{22q} b_{jq}, \tag{6}$$

$$\left[a^+_{jq}, H\right] = -K^{(j)}_{11q} a^+_{jq} - K^{(j)}_{12q} b^+_{jq}, \tag{7}$$

$$\left[b^+_{jq}, H\right] = K^{+(j)}_{21q} a^+_{jq} + K^{+(j)}_{22q} b^+_{jq}. \tag{8}$$

Тут

$$b_{jq} = \frac{1}{K^{(j)}_{12q}} \sum_{p_1+p_2=p'_1+p'_2} U_{p'_1 p'_2 p_2 p_1} (\delta_{2j} \delta_{p'_2 q} a^+_{1p'_1} + \\ + \delta_{1j} \delta_{p'_1 q} a^+_{2p'_2}) a_{2p_2} a_{1p_1}, \tag{9}$$

$$b^+_{jq} = \frac{1}{K^{(j)}_{12q}} \sum_{p_1+p_2=p'_1+p'_2} U_{p'_1 p'_2 p_2 p_1}{}^{+}_{1p'_1} a^+_{2p'_2} \times \\ \times (a_{2p_2} \delta_{1j} \delta_{p_1 q} + a_{1p_1} \delta_{2j} \delta_{p_2 q}), \tag{10}$$

$K^{(j)}_{11q} = \varepsilon_{jq}$, $K^{(j)}_{12q} = 1$, а $K^{(j)}_{21q}$, $K^{(j)}_{22q}$, $K^{+(j)}_{21q}$ та $K^{+(j)}_{22q}$ є невідомими функціями, які треба знайти. [..., ...] означає комутатор. Основним моментом прямого алгебраїчного методу є розкладання операторів в двооператорному базисі, що є аналогічним розкладанню векторів. В нашому випадку рівняння для операторів знищення розкладаються в базисі (a_{ip}, b_{jq}), а ермітово спряжені їм рівняння для операторів народження — в базисі (a^+_{ip}, b^+_{jq}). Використовуючи тотожність Якобі для трьох операторів

$$[[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] = 0, \tag{11}$$

отримуємо такі рівняння для комутаторів ($[..., ...]_-$) та антикомутаторів ($[..., ...]_+$):

$$\Big[[a_{ip}, a_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(j)}_{11q} + K^{(i)}_{11p})[a_{ip}, a_{jq}]_\pm + \\ + K^{(j)}_{12q}[a_{ip}, b_{jq}]_\pm + K^{(i)}_{12p}[b_{ip}, a_{jq}]_\pm, \tag{12}$$

$$\Big[[a_{ip}, b_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(i)}_{11p} + K^{(j)}_{22q})[a_{ip}, b_{jq}]_\pm + \\ + K^{(j)}_{21q}[a_{ip}, a_{jq}]_\pm + K^{(i)}_{12p}[b_{ip}, b_{jq}]_\pm, \tag{13}$$

$$\Big[[b_{ip}, a_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(i)}_{22p} + K^{(j)}_{11q})[b_{ip}, a_{jq}]_\pm + \\ + K^{(i)}_{21p}[a_{ip}, a_{jq}]_\pm + K^{(j)}_{12q}[b_{ip}, b_{jq}]_\pm, \tag{14}$$

$$\Big[[b_{ip}, b_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(j)}_{22q} + K^{(i)}_{22p})[b_{ip}, b_{jq}]_\pm + \\ + K^{(i)}_{21p}[a_{ip}, b_{jq}]_\pm + K^{(j)}_{21q}[b_{ip}, a_{jq}]_\pm, \tag{15}$$

$$\Big[[a^+_{ip}, a_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(j)}_{11q} - K^{(i)}_{11p})[a^+_{ip}, a_{jq}]_\pm + \\ + K^{(j)}_{12q}[a^+_{ip}, b_{jq}]_\pm - K^{(i)}_{12p}[b^+_{ip}, a_{jq}]_\pm, \tag{16}$$

$$\Big[[a^+_{ip}, b_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(j)}_{22q} - K^{(i)}_{11p})[a^+_{ip}, b_{jq}]_\pm + \\ + K^{(j)}_{21q}[a^+_{ip}, a_{jq}]_\pm - K^{(i)}_{12p}[b^+_{ip}, b_{jq}]_\pm, \tag{17}$$

$$\Big[[b^+_{ip}, a_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{+(i)}_{22p} + K^{(j)}_{11q})[b^+_{ip}, a_{jq}]_\pm + \\ + K^{+(i)}_{21p}[a^+_{ip}, a_{jq}]_\pm + K^{(j)}_{12q}[b^+_{ip}, b_{jq}]_\pm, \tag{18}$$

$$\Big[[b^+_{ip}, b_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(j)}_{22q} + K^{+(i)}_{22p})[b^+_{ip}, b_{jq}]_\pm + \\ + K^{+(i)}_{21p}[a^+_{ip}, b_{jq}]_\pm + K^{(j)}_{21q}[b^+_{ip}, a_{jq}]_\pm, \tag{19}$$

$$\Big[[a^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm, H\Big] = -(K^{(j)}_{11q} + K^{(i)}_{11p})[a^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm - \\ - K^{(j)}_{12q}[a^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm - K^{(i)}_{12p}[b^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm, \tag{20}$$

$$\Big[[a^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{+(j)}_{22q} - K^{(i)}_{11p})[a^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm +$$

$$+ K^{+(j)}_{21q}[a^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm - K^{(i)}_{12p}[b^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, \qquad (21)$$

$$\Big[[b^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{+(i)}_{22p} - K^{(j)}_{11q})[b^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm +$$

$$+ K^{+(i)}_{21p}[a^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm - K^{(j)}_{12q}[b^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, \qquad (22)$$

$$\Big[[b^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{+(j)}_{22q} + K^{+(i)}_{22p})[b^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm +$$

$$+ K^{+(i)}_{21p}[a^+_{ip}, b^+_{jq}]_\pm + K^{+(j)}_{21q}[b^+_{ip}, a^+_{jq}]_\pm, \qquad (23)$$

$$\Big[[a_{ip}, a^+_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(i)}_{11p} - K^{(j)}_{11q})[a_{ip}, a^+_{jq}]_\pm -$$

$$- K^{(j)}_{12q}[a_{ip}, b^+_{jq}]_\pm + K^{(i)}_{12p}[b_{ip}, a^+_{jq}]_\pm, \qquad (24)$$

$$\Big[[a_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(i)}_{11p} + K^{+(j)}_{22q})[a_{ip}, b^+_{jq}]_\pm +$$

$$+ K^{+(j)}_{21q}[a_{ip}, a^+_{jq}]_\pm + K^{(i)}_{12p}[b_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, \qquad (25)$$

$$\Big[[b_{ip}, a^+_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{(i)}_{22p} - K^{(j)}_{11q})[b_{ip}, a^+_{jq}]_\pm +$$

$$+ K^{(i)}_{21p}[a_{ip}, a^+_{jq}]_\pm - K^{(j)}_{12q}[b_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, \qquad (26)$$

$$\Big[[b_{ip}, b^+_{jq}]_\pm, H\Big] = (K^{+(j)}_{22q} + K^{(i)}_{22p})[b_{ip}, b^+_{jq}]_\pm +$$

$$+ K^{(i)}_{21p}[a_{ip}, b^+_{jq}]_\pm + K^{+(j)}_{21q}[b_{ip}, a^+_{jq}]_\pm. \qquad (27)$$

Враховуючи те, що

$$[a_{1p}, a_{2q}] = 0, \qquad (28)$$

можна отримати деякі важливі співвідношення. Зокрема, з рівняння (12), отримаємо

$$K^{(1)}_{12p}[b_{1p}, a_{2q}] + K^{(2)}_{12q}[a_{1p}, b_{2q}] = 0. \qquad (29)$$

Далі, беручи повторно комутатор рівняння (29) з гамільтоніаном, отримуємо

$$[b_{1p}, b_{2q}] = \frac{K^{(2)}_{11q} + K^{(1)}_{22p} - K^{(1)}_{11p} - K^{(2)}_{22q}}{2K^{(1)}_{12p}}[a_{1p}, b_{2q}]. \qquad (30)$$

Нарешті, беручи повторно комутатор рівняння (30) з гамільтоніаном, отримуємо

$$K^{(1)}_{12p}K^{(1)}_{21p} + \left(\frac{K^{(1)}_{22p} - K^{(1)}_{11p}}{2}\right)^2 = K^{(2)}_{12q}K^{(2)}_{21q} +$$

$$+ \left(\frac{K^{(2)}_{22q} - K^{(2)}_{11q}}{2}\right)^2 = \mathrm{const}. \qquad (31)$$

Зовсім аналогічно, з

$$[a^+_{1p}, a^+_{2q}] = 0 \qquad (32)$$

отримаємо

$$K^{(1)}_{12p}K^{(1)+}_{21p} - \left(\frac{K^{(1)+}_{22p} + K^{(1)}_{11p}}{2}\right)^2 = K^{(2)}_{12q}K^{(2)+}_{21q} -$$

$$- \left(\frac{K^{(2)+}_{22q} + K^{(2)}_{11q}}{2}\right)^2 = \mathrm{const}', \qquad (33)$$

а з

$$[a^+_{1p}, a_{2q}] = 0 \qquad (34)$$

отримаємо

$$K^{(1)}_{12p}K^{(1)+}_{21p} - \left(\frac{K^{(1)+}_{22p} + K^{(1)}_{11p}}{2}\right)^2 = -K^{(2)}_{12q}K^{(2)}_{21q} -$$

$$- \left(\frac{K^{(2)}_{11q} - K^{(2)}_{22q}}{2}\right)^2 = \mathrm{const}'. \qquad (35)$$

Порівнюючи (35) та (33), бачимо, що вони справджуються, якщо покласти: $K^{(2)+}_{21q} = -K^{(2)}_{21q}$ та $K^{(2)+}_{22q} = -K^{(2)}_{22q}$. Переставляючи індекси $1 \leftrightarrow 2$ в рівняннях (28), (32) та (34), отримуємо, що можна покласти й: $K^{(1)+}_{21q} = -K^{(1)}_{21q}$ та $K^{(1)+}_{22q} = -K^{(1)}_{22q}$. Крім того, $\mathrm{const}' = -\mathrm{const}$. Беручи комутатор співвідношення (2) з гамільтоніаном, з рівняння (16) за умови, що $i = j$, маємо

$$b^+_p a_q + a_q b^+_p = a^+_p b_q + b_q a^+_p. \qquad (36)$$

Тут і далі для спрощення запису формул ми не будемо виписувати індекси сорту частинок, коли вони однакові. Повторно беручи комутатор співвідношення (36) з гамільтоніаном, отримаємо

$$2(b^+_p b_q + b_q b^+_p) = 2K_{21p}\delta_{pq} + (K_{22p} +$$

$$+ K_{22q} - K_{11p} - K_{11q})(a^+_p b_q + b_q a^+_p). \qquad (37)$$

3. Основні співвідношення

Для будь-якого оператора A можемо ввести такі оператори:

$$\breve{A} = \rho^{-1} A \rho \qquad (38)$$

та

$$\widehat{A} = \rho A \rho^{-1}, \tag{39}$$

де ρ – статистичний оператор системи. Тоді можемо застосовувати такі розкладання:

$$\breve{a}_{ip} = F^{(i)}_{11p} a_{ip} + F^{(i)}_{12p} b_{ip}, \tag{40}$$

$$\breve{b}_{ip} = F^{(i)}_{21p} a_{ip} + F^{(i)}_{22p} b_{ip}, \tag{41}$$

$$\widehat{a}_{ip} = G^{(i)}_{11p} a_{ip} + G^{(i)}_{12p} b_{ip}, \tag{42}$$

$$\widehat{b}_{ip} = G^{(i)}_{21p} a_{ip} + G^{(i)}_{22p} b_{ip}, \tag{43}$$

$$\breve{a}^{+}_{ip} = F^{+(i)}_{11p} a^{+}_{ip} + F^{+(i)}_{12p} b^{+}_{ip}, \tag{44}$$

$$\breve{b}^{+}_{ip} = F^{+(i)}_{21p} a^{+}_{ip} + F^{+(i)}_{22p} b^{+}_{ip}, \tag{45}$$

$$\widehat{a}^{+}_{ip} = G^{+(i)}_{11p} a^{+}_{ip} + G^{+(i)}_{12p} b^{+}_{ip}, \tag{46}$$

$$\widehat{b}^{+}_{ip} = G^{+(i)}_{21p} a^{+}_{ip} + G^{+(i)}_{22p} b^{+}_{ip}, \tag{47}$$

які відіграють суттєву роль в наступному застосуванні методу. Тут, як і в (8), знаком "+" позначено матричні елементи, що відповідають операторам народження, а не операцію спряження! Для середніх значень маємо

$$\langle \breve{a}_{ip} \rangle = F^{(i)}_{11p} \langle a_{ip} \rangle + F^{(i)}_{12p} \langle b_{ip} \rangle, \tag{48}$$

$$\langle \breve{b}_{ip} \rangle = F^{(i)}_{21p} \langle a_{ip} \rangle + F^{(i)}_{22p} \langle b_{ip} \rangle \tag{49}$$

та

$$\langle \widehat{a}_{ip} \rangle = G^{(i)}_{11p} \langle a_{ip} \rangle + G^{(i)}_{12p} \langle b_{ip} \rangle, \tag{50}$$

$$\langle \widehat{b}_{ip} \rangle = G^{(i)}_{21p} \langle a_{ip} \rangle + G^{(i)}_{22p} \langle b_{ip} \rangle. \tag{51}$$

Тут введено таке позначення середнього значення операторів:

$$\langle A \rangle = \mathrm{Sp}(\rho A). \tag{52}$$

Sp означає слід оператора. Застосовуючи співвідношення

$$\mathrm{Sp}(AB) = \mathrm{Sp}(BA), \tag{53}$$

маємо

$$\langle \breve{a}_{ip} \rangle = F^{(i)}_{11p} \langle a_{ip} \rangle + F^{(i)}_{12p} \langle b_{ip} \rangle = \langle a_{ip} \rangle, \tag{54}$$

$$\langle \breve{b}_{ip} \rangle = F^{(i)}_{21p} \langle a_{ip} \rangle + F^{(i)}_{22p} \langle b_{ip} \rangle = \langle b_{ip} \rangle, \tag{55}$$

$$\langle \widehat{a}_{ip} \rangle = G^{(i)}_{11p} \langle a_{ip} \rangle + G^{(i)}_{12p} \langle b_{ip} \rangle = \langle a_{ip} \rangle, \tag{56}$$

$$\langle \widehat{b}_{ip} \rangle = G^{(i)}_{21p} \langle a_{ip} \rangle + G^{(i)}_{22p} \langle b_{ip} \rangle = \langle b_{ip} \rangle. \tag{57}$$

Звідси відразу знаходимо, що

$$\langle b_{ip} \rangle = \frac{1 - F^{(i)}_{11p}}{F^{(i)}_{12p}} \langle a_{ip} \rangle = \frac{1 - G^{(i)}_{11p}}{G^{(i)}_{12p}} \langle a_{ip} \rangle \tag{58}$$

при наступних умовах для матриць розкладання:

$$F^{(i)}_{21p} F^{(i)}_{12p} = (1 - F^{(i)}_{22p})(1 - F^{(i)}_{11p}), \tag{59}$$

$$G^{(i)}_{21p} G^{(i)}_{12p} = (1 - G^{(i)}_{22p})(1 - G^{(i)}_{11p}), \tag{60}$$

$$\frac{1 - F^{(i)}_{11p}}{F^{(i)}_{12p}} = \frac{1 - G^{(i)}_{11p}}{G^{(i)}_{12p}}, \tag{61}$$

$$\frac{1 - F^{(i)}_{22p}}{F^{(i)}_{21p}} = \frac{1 - G^{(i)}_{22p}}{G^{(i)}_{21p}}. \tag{62}$$

Комбінуючи, отримуємо:

$$F^{(i)}_{21p} G^{(i)}_{12p} = (1 - F^{(i)}_{22p})(1 - G^{(i)}_{11p}), \tag{63}$$

$$G^{(i)}_{21p} F^{(i)}_{12p} = (1 - G^{(i)}_{22p})(1 - F^{(i)}_{11p}). \tag{64}$$

Для ермітово спряжених операторів народження отримаємо

$$\langle b^{+}_{ip} \rangle = \frac{1 - F^{+(i)}_{11p}}{F^{+(i)}_{12p}} \langle a^{+}_{ip} \rangle = \frac{1 - G^{+(i)}_{11p}}{G^{+(i)}_{12p}} \langle a^{+}_{ip} \rangle \tag{65}$$

та

$$F^{+(i)}_{21p} F^{+(i)}_{12p} = (1 - F^{+(i)}_{22p})(1 - F^{+(i)}_{11p}), \tag{66}$$

$$G^{+(i)}_{21p} G^{+(i)}_{12p} = (1 - G^{+(i)}_{22p})(1 - G^{+(i)}_{11p}), \tag{67}$$

$$\frac{1 - F^{+(i)}_{11p}}{F^{+(i)}_{12p}} = \frac{1 - G^{+(i)}_{11p}}{G^{+(i)}_{12p}}, \tag{68}$$

$$\frac{1 - F^{+(i)}_{22p}}{F^{+(i)}_{21p}} = \frac{1 - G^{+(i)}_{22p}}{G^{+(i)}_{21p}}, \tag{69}$$

$$F^{+(i)}_{21p} G^{+(i)}_{12p} = (1 - F^{+(i)}_{22p})(1 - G^{+(i)}_{11p}), \tag{70}$$

$$G^{+(i)}_{21p} F^{+(i)}_{12p} = (1 - G^{+(i)}_{22p})(1 - F^{+(i)}_{11p}). \tag{71}$$

Використовуючи співвідношення (53), можна знайти такі співвідношення для добутків двох операторів:

$$\langle BA \rangle = \langle A \widehat{B} \rangle = \langle \breve{A} B \rangle. \tag{72}$$

Ці основні співвідношення між кореляційними функціями можна використати для знаходження невідомих матриць $\hat{F}$ та $\hat{G}$. Далі будемо розглядати випадки наявності ненульових кореляцій. Наприклад, для випадку $\langle a_p a_q \rangle \neq 0$, коли $i = j$, матимемо:

$$-\langle a_p a_q \rangle = \langle a_q a_p \rangle = \langle \breve{a}_p a_q \rangle = F_{11p} \langle a_p a_q \rangle + F_{12p} \langle b_p a_q \rangle, \tag{73}$$

$$-\langle a_p a_q \rangle = \langle a_q a_p \rangle = \langle a_p \widehat{a}_q \rangle = G_{11q} \langle a_p a_q \rangle + G_{12q} \langle a_p b_q \rangle, \tag{74}$$

звідки отримаємо

$$\langle b_p a_q \rangle = -\frac{1 + F_{11p}}{F_{12p}} \langle a_p a_q \rangle, \tag{75}$$

$$\langle a_p b_q \rangle = -\frac{1 + G_{11q}}{G_{12q}} \langle a_p a_q \rangle. \tag{76}$$

Використовуючи решту співвідношень

$$\langle a_q b_p \rangle = F_{21p} \langle a_p a_q \rangle + F_{22p} \langle b_p a_q \rangle =$$

$$= G_{11q} \langle b_p a_q \rangle + G_{12q} \langle b_p b_q \rangle, \tag{77}$$

$$\langle b_q a_p \rangle = F_{11p} \langle a_p b_q \rangle + F_{12p} \langle b_p b_q \rangle =$$

$$= G_{21q} \langle a_p a_q \rangle + G_{22q} \langle a_p b_q \rangle, \tag{78}$$

знаходимо

$$\langle b_p b_q \rangle = \frac{1 - \mathrm{Sp}\hat{F} - F_{22p} + G_{11q}(1 + F_{11p})}{F_{12p} G_{12q}} \langle a_p a_q \rangle \tag{79}$$

та

$$\langle b_p b_q \rangle = \frac{1 - \mathrm{Sp}\hat{G} - G_{22q} + F_{11p}(1 + G_{11q})}{F_{12p} G_{12q}} \langle a_p a_q \rangle. \tag{80}$$

Звідси маємо

$$\mathrm{Sp}\hat{G} = \mathrm{Sp}\hat{F} \tag{81}$$

та

$$\langle b_p b_q \rangle = \frac{1 - F_{22p} - G_{22q} + F_{11p} G_{11q}}{F_{12p} G_{12q}} \langle a_p a_q \rangle. \tag{82}$$

Нарешті, отримаємо

$$\langle a_q b_p \rangle = \frac{1 - \mathrm{Sp}\hat{F} - F_{22p}}{F_{12p}} \langle a_p a_q \rangle, \tag{83}$$

$$\langle b_q a_p \rangle = \frac{1 - \mathrm{Sp}\hat{G} - G_{22q}}{G_{12q}} \langle a_p a_q \rangle, \tag{84}$$

$$\langle b_q b_p \rangle = \frac{(G_{22q} + \mathrm{Sp}\hat{G} - 1) G_{11p} - 1 - G_{11q}}{G_{12p} G_{12q}} \langle a_p a_q \rangle. \tag{85}$$

Повністю аналогічно, для $\langle a_p^+ a_q^+ \rangle \neq 0$ знайдемо такі співвідношення для матриць $\hat{F}^+$ та $\hat{G}^+$:

$$\langle b_p^+ a_q^+ \rangle = -\frac{1 + F_{11p}^+}{F_{12p}^+} \langle a_p^+ a_q^+ \rangle, \tag{86}$$

$$\langle a_p^+ b_q^+ \rangle = -\frac{1 + G_{11q}^+}{G_{12q}^+} \langle a_p^+ a_q^+ \rangle, \tag{87}$$

$$\mathrm{Sp}\hat{F}^+ = \mathrm{Sp}\hat{G}^+ \tag{88}$$

та

$$\langle b_p^+ b_q^+ \rangle = \frac{1 - F_{22p}^+ - G_{22q}^+ + F_{11p}^+ G_{11q}^+}{F_{12p}^+ G_{12q}^+} \langle a_p^+ a_q^+ \rangle, \tag{89}$$

$$\langle a_q^+ b_p^+ \rangle = \frac{1 - \mathrm{Sp}\hat{F}^+ - F_{22p}^+}{F_{12p}^+} \langle a_p^+ a_q^+ \rangle, \tag{90}$$

$$\langle b_q^+ a_p^+ \rangle = \frac{1 - \mathrm{Sp}\hat{G}^+ - G_{22q}^+}{G_{12q}^+} \langle a_p^+ a_q^+ \rangle, \tag{91}$$

$$\langle b_q^+ b_p^+ \rangle = \frac{(G_{22q}^+ + \mathrm{Sp}\hat{G}^+ - 1) G_{11p}^+ - 1 - G_{11q}^+}{G_{12p}^+ G_{12q}^+} \langle a_p^+ a_q^+ \rangle. \tag{92}$$

З

$$\langle a_p a_q \rangle = F_{11q} \langle a_q a_p \rangle + F_{12q} \langle b_q a_p \rangle \tag{93}$$

отримаємо

$$G_{12q}(1 + F_{11q}) + (G_{22q} + \mathrm{Sp}\hat{G} - 1) F_{12q} = 0, \tag{94}$$

а з

$$\langle a_p a_q \rangle = G_{11p} \langle a_q a_p \rangle + G_{12p} \langle a_q b_p \rangle - \tag{95}$$

$$F_{12q}(1 + G_{11q}) + (F_{22q} + \mathrm{Sp}\hat{F} - 1) G_{12q} = 0. \tag{96}$$

Звідси:

$$G_{12q} = -F_{12q} \tag{97}$$

та

$$(1 - F_{22q}) G_{12q} = (1 - G_{22q}) F_{12q}, \tag{98}$$

що дає

$$G_{22q} + F_{22q} = 2. \tag{99}$$

А також

$$G_{22q} + \mathrm{Sp}\hat{G} - 1 = 1 + F_{11q} \tag{100}$$

та

$$F_{22q} + \mathrm{Sp}\hat{F} - 1 = 1 + G_{11q}. \tag{101}$$

Нарешті, з (61) та (97) випливає, що

$$G_{11q} - 1 = 1 - F_{11q}. \tag{102}$$

Враховуючи останнє, з (100) маємо

$$\begin{aligned} &G_{22q} + \mathrm{Sp}\hat{G} - 1 = 2G_{22q} + G_{11q} - 1 = \\ &= 2G_{22q} - F_{11q} + 1 = 1 + F_{11q}. \end{aligned} \tag{103}$$

Остаточно з (103):

$$F_{11q} = G_{22q}. \tag{104}$$

Аналогічно, з (101) випливає, що

$$G_{11q} = F_{22q}. \tag{105}$$

З останніх співвідношень та з (100), (101) маємо:

$$\mathrm{Sp}\hat{F} = \mathrm{Sp}\hat{G} = 2. \tag{106}$$

Аналогічно, маємо

$$G^{+}_{12p} = -F^{+}_{12p}, \tag{107}$$

$$G^{+}_{22p} + F^{+}_{22p} = 2, \tag{108}$$

$$G^{+}_{11p} - 1 = 1 - F^{+}_{11p}, \tag{109}$$

$$F^{+}_{11p} = G^{+}_{22p}, \tag{110}$$

$$G^{+}_{11p} = F^{+}_{22p}, \tag{111}$$

$$\mathrm{Sp}\hat{F}^{+} = \mathrm{Sp}\hat{G}^{+} = 2. \tag{112}$$

Далі використаємо такі співвідношення для добутку двох операторів:

$$\begin{aligned} &\langle AB\rangle^{+} = [\mathrm{Sp}(\rho AB)]^{+} = \mathrm{Sp}\{(AB)^{+}\rho^{+}\} = \\ &= \mathrm{Sp}\{(AB)^{+}\rho\} = \mathrm{Sp}\{\rho(AB)^{+}\} = \\ &= \langle (AB)^{+}\rangle = \langle B^{+}A^{+}\rangle. \end{aligned} \tag{113}$$

Відтак:

$$\langle AB\rangle^{+} = \langle B^{+}A^{+}\rangle. \tag{114}$$

Тому, вважаючи всі невідомі елементи матриць дійсними, з (83) та (86) отримуємо:

$$(1 + F^{+}_{11p})F_{12p} = (1 - \mathrm{Sp}\hat{F} - F_{22p})F^{+}_{12p}, \tag{115}$$

а з (84) та (87), в свою чергу, з урахуванням (97) та (107):

$$(1 + G^{+}_{11p})F_{12p} = (1 - \mathrm{Sp}\hat{G} - G_{22p})F^{+}_{12p}. \tag{116}$$

Звідси маємо остаточно, враховуючи (106):

$$(1 + G_{22p})(1 + F^{+}_{11p}) = (1 + F_{22p})(1 + G^{+}_{11p}), \tag{117}$$

якщо виконується одна з наступних умов (ми розглядаємо лише варіанти, в яких недіагональні елементи матриць розкладання з індексом 12 ненульові):

$$1 + F_{22p} \neq 0, \tag{118}$$

$$1 + G^{+}_{11p} \neq 0, \tag{119}$$

$$1 + G_{22p} \neq 0, \tag{120}$$

$$1 + F^{+}_{11p} \neq 0. \tag{121}$$

З урахуванням (104), (105) та (110), (111), рівняння (117) дає:

$$F^{+}_{11p} = F_{22p}, \tag{122}$$

$$F^{+}_{22p} = F_{11p}, \tag{123}$$

$$G^{+}_{11p} = G_{22p}, \tag{124}$$

$$G^{+}_{22p} = G_{11p}. \tag{125}$$

Нарешті, з (115), з врахуванням (97) та (107), маємо:

$$F^{+}_{12p} = -F_{12p} = G_{12p} = -G^{+}_{12p}. \tag{126}$$

Звідси та з (60), (63), (66), (67) випливають такі корисні співвідношення:

$$G_{21q}G_{12q} = -(1 - F_{11q})^{2}, \tag{127}$$

$$F_{21q}G_{12q} = (1 - F_{11q})^{2}, \tag{128}$$

$$F^{+}_{21p}G_{12p} = -(1 - F_{11p})^{2}, \tag{129}$$

$$G^{+}_{21p}G_{12p} = (1 - F_{11p})^{2}. \tag{130}$$

Далі, маємо, що

$$\delta_{pq} - \langle a_p^+ a_q \rangle = \langle a_q a_p^+ \rangle = F_{11p}^+ \langle a_p^+ a_q \rangle + $$
$$+ F_{12p}^+ \langle b_p^+ a_q \rangle = G_{11q} \langle a_p^+ a_q \rangle + G_{12q} \langle a_p^+ b_q \rangle, \quad (131)$$

звідки отримуємо

$$\langle b_p^+ a_q \rangle = \frac{\delta_{pq} - (1 + F_{11p}^+)\langle a_p^+ a_q \rangle}{F_{12p}^+} =$$
$$= \frac{\delta_{pq} + (F_{11p} - 3)\langle a_p^+ a_q \rangle}{G_{12p}}, \quad (132)$$
$$\langle a_p^+ b_q \rangle = \frac{\delta_{pq} - (1 + G_{11q})\langle a_p^+ a_q \rangle}{G_{12q}} =$$
$$= \frac{\delta_{pq} + (F_{11q} - 3)\langle a_p^+ a_q \rangle}{G_{12q}}. \quad (133)$$

З

$$\langle a_p^+ a_q \rangle = G_{11p}^+ \langle a_q a_p^+ \rangle + G_{12p}^+ \langle a_q b_p^+ \rangle =$$
$$= F_{11q} \langle a_q a_p^+ \rangle + F_{12q} \langle b_q a_p^+ \rangle \quad (134)$$

отримаємо

$$\langle b_q a_p^+ \rangle = \frac{F_{11q}\delta_{pq} - (1 + F_{11q})\langle a_p^+ a_q \rangle}{G_{12q}} \quad (135)$$

та

$$\langle a_q b_p^+ \rangle = \frac{F_{11p}\delta_{pq} - (1 + F_{11p})\langle a_p^+ a_q \rangle}{G_{12p}}. \quad (136)$$

Продовжуючи, з

$$\langle b_q a_p^+ \rangle = F_{11p}^+ \langle a_p^+ b_q \rangle + F_{12p}^+ \langle b_p^+ b_q \rangle \quad (137)$$

маємо:

$$\langle b_p^+ b_q \rangle = \frac{F_{11p}F_{11q} - 3(F_{11p} + F_{11q}) + 5}{G_{12p}G_{12q}} \langle a_p^+ a_q \rangle, \quad (138)$$

а з

$$\langle b_p^+ a_q \rangle = F_{11q} \langle a_q b_p^+ \rangle + F_{12q} \langle b_q b_p^+ \rangle : \quad (139)$$
$$\langle b_q b_p^+ \rangle = \{(F_{11p}^2 - 1)\delta_{pq} + (3 - F_{11p} - F_{11q} -$$
$$- F_{11p}F_{11q})\langle a_p^+ a_q \rangle\} \div (G_{12p}G_{12q}). \quad (140)$$

Насамкінець, з

$$\langle b_p^+ b_q \rangle = F_{21q} \langle a_q b_p^+ \rangle + F_{22q} \langle b_q b_p^+ \rangle \quad (141)$$

отримуємо, що

$$F_{11q} = 1. \quad (142)$$

З середнього значення (36) випливає, що

$$G_{12q} = G_{12p} = G_{12} \neq 0 \quad (143)$$

є константою. А усереднюючи (37), отримуємо:

$$\langle a_p^+ a_q \rangle = \frac{K_{21p}G_{12} + 2(K_{22p} - K_{11p})}{4(K_{22p} - K_{11p})} \delta_{pq}. \quad (144)$$

Враховуючи, що оператори з різними індексами сорту частинок комутують, повторюючи попередні розрахунки для випадку $j \neq i$, отримуємо такі загальні співвідношення:

$$\langle a_{jq} b_{ip} \rangle = \langle b_{ip} a_{jq} \rangle = \frac{1 - F_{11p}^{(i)}}{F_{12p}^{(i)}} \langle a_{ip} a_{jq} \rangle = 0, \quad (145)$$

$$\langle b_{jq} a_{ip} \rangle = \langle a_{ip} b_{jq} \rangle = \frac{1 - G_{11q}^{(j)}}{G_{12q}^{(j)}} \langle a_{ip} a_{jq} \rangle = 0, \quad (146)$$

$$\langle b_{jq} b_{ip} \rangle = \langle b_{ip} b_{jq} \rangle = \frac{(1 - F_{11p}^{(i)})(1 - G_{11q}^{(j)})}{F_{12p}^{(i)} G_{12q}^{(j)}} \langle a_{ip} a_{jq} \rangle = 0, \quad (147)$$

$$\langle a_{jq} b_{ip}^+ \rangle = \langle b_{ip}^+ a_{jq} \rangle = \frac{1 - F_{11p}^{+(i)}}{F_{12p}^{+(i)}} \langle a_{ip}^+ a_{jq} \rangle = 0, \quad (148)$$

$$\langle b_{jq} a_{ip}^+ \rangle = \langle a_{ip}^+ b_{jq} \rangle = \frac{1 - G_{11q}^{(j)}}{G_{12q}^{(j)}} \langle a_{ip}^+ a_{jq} \rangle = 0, \quad (149)$$

$$\langle b_{jq} b_{ip}^+ \rangle = \langle b_{ip}^+ b_{jq} \rangle = \frac{(1 - F_{11p}^{+(i)})(1 - G_{11q}^{(j)})}{F_{12p}^{+(i)} G_{12q}^{(j)}} \langle a_{ip}^+ a_{jq} \rangle = 0, \quad (150)$$

$$\langle a_{jq}^+ b_{ip}^+ \rangle = \langle b_{ip}^+ a_{jq}^+ \rangle = \frac{1 - F_{11p}^{(i)+}}{F_{12p}^{(i)+}} \langle a_{ip}^+ a_{jq}^+ \rangle = 0, \quad (151)$$

$$\langle b_{jq}^+ a_{ip}^+ \rangle = \langle a_{ip}^+ b_{jq}^+ \rangle = \frac{1 - G_{11q}^{(j)+}}{G_{12q}^{(j)+}} \langle a_{ip}^+ a_{jq}^+ \rangle = 0, \quad (152)$$

$$\langle b_{jq}^+ b_{ip}^+ \rangle = \langle b_{ip}^+ b_{jq}^+ \rangle = \frac{(1 - F_{11p}^{(i)+})(1 - G_{11q}^{(j+)})}{F_{12p}^{(i)+} G_{12q}^{(j)+}} \langle a_{ip}^+ a_{jq}^+ \rangle = 0. \quad (153)$$

ISSN 0372-400X. Укр. фіз. журн. 2015. Т. 60, № 11

4. Енергія елементарних збуджень у випадку трикутної форми матриць розкладання

Нагадаємо, що з урахуванням (142) з (104), (105), (110), (111) та (122)–(125) випливає:

$$G_{22}=F_{22}=G_{11}=F_{11}=G^{+}_{22}=F^{+}_{22}=G^{+}_{11}=F^{+}_{11}=1. \tag{154}$$

Розглянемо деякі наслідки отриманих результатів. З (58) та (65) це дає:

$$\langle b^{+}_{ip}\rangle=\langle b_{iq}\rangle=0. \tag{155}$$

З (127)–(130), враховуючи (142) та (143), випливає, що

$$G_{21}=G^{+}_{21}=F_{21}=F^{+}_{21}=0. \tag{156}$$

Використаємо формулу (3.4.12) з [1] у вигляді

$$K_{21p}\langle a_p a^{+}_p\rangle+(K_{22p}-K_{11p})\langle a_p b^{+}_p\rangle-K_{12p}\langle b_p b^{+}_p\rangle=0. \tag{157}$$

Враховуючи отримані вище результати, звідси маємо, що

$$\langle a^{+}_p a_p\rangle=\frac{K_{21p}G_{12}+K_{22p}-K_{11p}}{K_{21p}G_{12}+2(K_{22p}-K_{11p})}. \tag{158}$$

Нарешті, з (144) випливає, що остаточно маємо

$$\langle a^{+}_p a_q\rangle=\frac{\delta_{pq}}{2}, \tag{159}$$

а також

$$K_{21}=0. \tag{160}$$

Враховуючи (31), маємо

$$K^{(i)}_{22p}=K^{(i)}_{11p}\pm K, \tag{161}$$

де K – невідома константа. Зазначимо, що, враховуючи (158), необхідно, щоб $K\neq 0$. В противному разі, якщо в (157) покласти одночасно і $K_{21}=0$, і $K_{22p}=K_{11p}$, тоді рівняння (157) задовольняється автоматично, і $\langle a^{+}_p a_p\rangle$ залишається невизначеним! Відтак, фактично, ми далі розглядатимемо лише один з можливих варіантів – коли справджується (159). З (143), (154), (156) та (160) бачимо, що всі матриці розкладання для даного випадку є трикутними. Згідно з концепцією автора ПАМ, власні значення матриці розкладання визначають енергію елементарних збуджень кулонівської пари [1]. Для трикутної форми власні значення матриці збігаються з її діагональними елементами. З (161) бачимо, що енергія елементарних збуджень збігається з кінетичною енергією частинок, або відрізняється від неї лише на константу.

5. Деякі висновки

Оскільки величина $n_{ip}=\langle a^{+}_{ip}a_{ip}\rangle$ означає середню кількість частинок сорту i, що перебувають у стані з певною проекцією спіну s_z та певним імпульсом $\vec{p}=(p_x,p_y,p_z)$, з (159) бачимо, що для кожної з частинок пари, що розглядається, є лише два можливі стани. Це можуть бути різні варіанти, що відповідають певному спіну та імпульсу пари. Нагадаємо, що ми розглядали лише випадок ненульових аномальних функцій розподілу, коли $\langle a_{ip}a_{iq}\rangle\neq 0$ та $\langle a^{+}_{ip}a^{+}_{iq}\rangle\neq 0$, що і є умовою наявності спарювання частинок. Цікаво звернути увагу на випадок, коли сумарний імпульс пари рівний нулю або імпульси окремих частинок протилежні за напрямком. Тоді сумарний струм пари буде ненульовим і матимемо генерацію магнітного поля як ефект кулонівського спарювання.

Отримані результати дозволяють зробити висновок, що ПАМ є ефективним методом описання кореляцій в системі двох частинок, що підлягають електростатичній взаємодії. Він дозволяє вже в другому порядку знайти майже всі невідомі компоненти матриць розкладання та співвідношення для кореляційних функцій. Але, оскільки знаходження середнього значення енергії системи вимагає знайти кореляційні функції четвертого порядку, в даній статті лише закладені основи точної теорії кулонівської пари. Зазначимо, що ми ще ніде не використали явний вигляд потенціальної енергії взаємодії, який впливає лише на результати для третього, четвертого та вищих порядків кореляційних функцій.

1. М.Ф. Сарры, УФН **161**, №11, 47.
2. Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Боголюбов (мл.), *Введение в квантовую статистическую механику* (Москва, Наука, 1984).

Одержано 22.10.14

В.И. Васькивский (В.І. Васьківський)

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ
КУЛОНОВСКОЙ ПАРЫ

Р е з ю м е

Впервые публикуются результаты, полученные прямым алгебраическим методом, для корреляционных функций двух частиц с кулоновским взаимодействием. Эффективность этого метода продемонстрирована нахождением во втором порядке почти всех неизвестных матричных элементов матриц разложения.

V.I. Vaskivskyi (В.І. Васьківський)

CORRELATION FUNCTIONS OF COULOMB PAIR

S u m m a r y

The correlation functions of two electrostatically interacting particles have been obtained for the first time, by using the direct algebraic method for finding the cross-correlation functions. The efficiency of this method has been demonstrated by finding almost all unknown elements of the decomposition matrices in the second-order approximation.