В.І. ВАСЬКІВСЬКИЙ
Інститут фізики твердого тіла БАН – Софія
(Бульв. Цариградско шосе, 72, Софія 1784, Болгарія; e-mail: socyst@yandex.ru)

УДК 538.94

КОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ КУЛОНІВСЬКОЇ ПАРИ ТРЕТЬОГО ПОРЯДКУ

В статті вперше публікуються результати для кореляційних функцій третього порядку для випадку двох частинок, що підлягають електростатичній взаємодії, отримані прямим алгебраїчним методом знаходження кореляційних функцій. Розглянуті як основні співвідношення для цих кореляційних функцій, що не залежать від явного вигляду потенціалу взаємодії частинок, так і 4 види форм оператора взаємодії та співвідношення для кореляційних функцій, які для них виникають.

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

1. Вступ

В даній статті ми продовжимо розгляд точної теорії кулонівської пари, основи якої вже були опубліковані в [1]. Нагадаємо, що в основі такої теорії є модифікація прямого алгебраїчного методу знаходження кореляційних функцій (ПАМ), запропонованого в [2]. Кореляція частинок, що утворюють кулонівську пару, є чисто квантовим ефектом, який не може бути задовільно описаний пертурбативними методами. Серед інших методів слід згадати метод функцій Гріна, який широко застосовувався до появи ПАМ, і з метою подолання недоліків якого, власне, ПАМ і був розробленим [2]. Основною проблемою було те, що рівняння для функцій Гріна нижчих порядків включають невідомі функції Гріна вищих порядків. Спроби обійти цю проблему зводились до заміни цих невідомих функцій Гріна вищих порядків якимись наближеними виразами, що перетворювало цей потенційно точний метод в наближений. Альтернативний, розроблений на основі концепції фермі-рідини Ландау напівфеноменологічний метод, в реалізації якого значні досягнення має українська школа ([3–6]), також дозволяє описати ефекти спарювання та кореляції частинок. Широко використовують також перетворення Боголюбова [7] і моделі, наприклад, модель Хаббарда [8] та інші [9]. Подання детальної бібліографії на тему використання різних методів та моделей для описання ефектів кореляції виходить за рамки завдання цієї статті. Цими зауваженнями ми лише намагаємось підкреслити актуальність продовження розробки прямого алгебраїчного методу знаходження кореляційних функцій, який буде безпосереднім предметом нашого розгляду далі. Результати, вже отримані нами в другому порядку [1], відкривають можливість продовжити розробку точної теорії кулонівської пари.

Тепер ми зосередимось на знаходженні кореляційних функцій третього порядку та відповідних співвідношень, що виникають в третьому порядку. Нагадаємо, що для випадку системи двох різних частинок, що підлягають електростатичній взаємодії, метод ПАМ спирається на розкладанні операторів часток в двооператорному базисі. Крім того, використовується те, що слід добутку двох операторів не змінюється при їх перестановці. Це дає змогу генерувати різноманітні співвідношення для кореляційних функцій. Спочатку ми розглянемо рівняння руху третього порядку для операторів. Далі ми розглянемо основні співвідношення для кореляційних функцій третього порядку, які не залежать від явного вигляду потенціалу взаємодії частинок. Нарешті, ми розглянемо 4 види можливих форм оператора взаємодії та співвідношення для кореляційних функцій, які для них виникають. В цій статті вперше публікуються результати, отримані методом ПАМ в третьому порядку.

2. Рівняння для операторів

Ще раз нагадаємо, що ми розглядаємо модифікацію прямого алгебраїчного методу знаходження кореляційних функцій, запропонованого в [2]. Для цього використовуються рівняння руху для операторів народження та знищення. Далі розглядатимемо систему, яка складається з двох різних частинок, що підлягають електростатичній взаємодії. Гамільтоніан цієї системи в представленні вторинного квантування [10] матиме такий вигляд:

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

де

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

є гамільтоніан вільної частинки сорту i, а

$$H_{12} = \sum_{p_1+p_2=p_1'+p_2'} U_{p_1'p_2'p_2p_1} a^+_{1p_1'} a^+_{2p_2'} a_{2p_2} a_{1p_1}$$

є 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. $U_{p_1'p_2'p_2p_1}$ є потенційною енергією взаємодії в імпульсному представленні. Будемо вважати, що обидві частинки є ферміонами, для яких виконуються такі співвідношення антикомутації (δ_{pq} – символ Кронекера):

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

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

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

Також далі ми будемо використовувати те, що оператори частинок різних сортів комутують між собою.

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

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

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

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

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

Тут

$$b_{jq} = \frac{1}{K^{(j)}_{12q}} \sum_{p_1+p_2=p_1'+p_2'} U_{p_1'p_2'p_2p_1} (\delta_{2j}\delta_{p_2'q} a^+_{1p_1'} + \\ + \delta_{1j}\delta_{p_1'q} a^+_{2p_2'}) a_{2p_2} a_{1p_1}, \tag{9}$$

$$b^+_{jq} = \frac{1}{K^{(j)}_{12q}} \sum_{p_1+p_2=p_1'+p_2'} U_{p_1'p_2'p_2p_1}{}^{+}_{1p_1'} a^+_{2p_2'} \times \\ \times (a_{2p_2}\delta_{1j}\delta_{p_1q} + a_{1p_1}\delta_{2j}\delta_{p_2q}). \tag{10}$$

$K^{(j)}_{11q} = \varepsilon_{jq}$, $K^{(j)}_{12q} = 1$, а $K^{(j)}_{22q} = K^{(j)}_{11q} \pm K$, де $K \neq 0$ є невідомою константою, яку треба знайти [1]. [..., ...] означає комутатор. Основним моментом прямого алгебраїчного методу є розкладання операторів у 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}). Далі ми будемо вважати, що у всіх рівняннях та співвідношеннях $j \neq i$. Використовуючи послідовно наступну тотожність для операторів

$$[AB, H] = [A, H]\, B + A\, [B, H], \tag{11}$$

отримуємо такі корисні рівняння руху третього прядку за участю антикомутаторів двох операторів:

$$\left[[a^+_{ip}, a_{iq}]_+ a_j, H\right] = (\varepsilon_{iq} - \varepsilon_{ip} + \varepsilon_j)[a^+_{ip}, a_{iq}]_+ a_j + \\ + [a^+_{ip}, b_{iq}]_+ a_j + [a^+_{ip}, a_{iq}]_+ b_j - [b^+_{ip}, a_{iq}]_+ a_j, \tag{12}$$

$$\left[[b^+_{ip}, a_{iq}]_+ a_j, H\right] = (\varepsilon_{iq} - K^{(i)}_{22p} + \varepsilon_j)[b^+_{ip}, a_{iq}]_+ a_j + \\ + [b^+_{ip}, b_{iq}]_+ a_j + [b^+_{ip}, a_{iq}]_+ b_j, \tag{13}$$

$$\left[[a^+_{ip}, b_{iq}]_+ a_j, H\right] = (K^{(i)}_{22q} - \varepsilon_{ip} + \varepsilon_j)[a^+_{ip}, b_{iq}]_+ a_j + \\ + [a^+_{ip}, b_{iq}]_+ b_j - [b^+_{ip}, b_{iq}]_+ a_j, \tag{14}$$

$$\left[[a^+_{ip}, a_{iq}]_+ b_j, H\right] = (K^{(j)}_{22} - \varepsilon_{ip} + \varepsilon_{iq})[a^+_{ip}, a_{iq}]_+ b_j + \\ + [a^+_{ip}, b_{iq}]_+ b_j - [b^+_{ip}, a_{iq}]_+ b_j, \tag{15}$$

$$\left[[a^+_{ip}, a_{iq}]_+ a^+_j, H\right] = (\varepsilon_{iq} - \varepsilon_{ip} - \varepsilon_j)[a^+_{ip}, a_{iq}]_+ a^+_j + \\ + [a^+_{ip}, b_{iq}]_+ a^+_j - [a^+_{ip}, a_{iq}]_+ b^+_j - [b^+_{ip}, a_{iq}]_+ a^+_j, \tag{16}$$

$$\left[[b^+_{ip}, a_{iq}]_+ a^+_j, H\right] = (\varepsilon_{iq} - K^{(i)}_{22p} - \varepsilon_j)[b^+_{ip}, a_{iq}]_+ a^+_j + \\ + [b^+_{ip}, b_{iq}]_+ a^+_j - [b^+_{ip}, a_{iq}]_+ b^+_j, \tag{17}$$

$$\left[[a^+_{ip}, b_{iq}]_+ a^+_j, H\right] = (K^{(i)}_{22q} - \varepsilon_{ip} - \varepsilon_j)[a^+_{ip}, b_{iq}]_+ a^+_j - \\ - [a^+_{ip}, b_{iq}]_+ b^+_j - [b^+_{ip}, b_{iq}]_+ a^+_j, \tag{18}$$

$$\Big[[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}b_{j}^{+},H\Big]=(\varepsilon_{iq}-\varepsilon_{ip}-K_{22}^{(j)})[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}b_{j}^{+}+ + [a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}b_{j}^{+}-[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}b_{j}^{+}, \tag{19}$$

$$\Big[a_j[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+},H\Big]=(\varepsilon_{iq}-\varepsilon_{ip}+\varepsilon_j)a_j[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}+ + a_j[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}+b_j[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}-a_j[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}, \tag{20}$$

$$\Big[a_j[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+},H\Big]=(\varepsilon_{iq}-K_{22p}^{(i)}+\varepsilon_j)a_j[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}+ + a_j[b_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}+b_j[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}, \tag{21}$$

$$\Big[a_j[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+},H\Big]=(K_{22q}^{(i)}-\varepsilon_{ip}+\varepsilon_j)a_j[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}+ + b_j[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}-a_j[b_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}, \tag{22}$$

$$\Big[b_j[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+},H\Big]=(K_{22}^{(j)}-\varepsilon_{ip}+\varepsilon_{iq})b_j[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}+ + b_j[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}-b_j[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}, \tag{23}$$

$$\Big[a_j^{+}[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+},H\Big]=(\varepsilon_{iq}-\varepsilon_{ip}-\varepsilon_j)a_j^{+}[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}+ + a_j^{+}[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}-b_j^{+}[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}-a_j^{+}[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}, \tag{24}$$

$$\Big[a_j^{+}[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+},H\Big]=(\varepsilon_{iq}-K_{22p}^{(i)}-\varepsilon_j)a_j^{+}[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}+ + a_j^{+}[b_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}-b_j^{+}[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}, \tag{25}$$

$$\Big[a_j^{+}[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+},H\Big]=(K_{22q}^{(i)}-\varepsilon_{ip}-\varepsilon_j)a_j^{+}[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}- - b_j^{+}[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}-a_j^{+}[b_{ip}^{+},b_{iq}]_{+} \tag{26}$$

$$\Big[b_j^{+}[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+},H\Big]=(\varepsilon_{iq}-\varepsilon_{ip}-K_{22}^{(j)})b_j^{+}[a_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}+ + b_j^{+}[a_{ip}^{+},b_{iq}]_{+}-b_j^{+}[b_{ip}^{+},a_{iq}]_{+}. \tag{27}$$

Це ще не всі можливі рівняння руху для операторів третього порядку, а лише ті, які будуть використані далі в тексті статті. Отримані рівняння дають змогу вивести рівняння для самих операторів третього порядку. Детальні викладки винесені в окремий додаток в кінці статті.

3. Основні співвідношення

Для будь-якого оператора A можемо ввести такі оператори:

$$\breve{A}=\rho^{-1}A\rho \tag{28}$$

та

$$\widehat{A}=\rho A\rho^{-1}, \tag{29}$$

де ρ є статистичним оператором системи. Тоді можемо застосовувати такі розкладання:

$$\breve{a}_{ip}=a_{ip}-G_ib_{ip}, \tag{30}$$

$$\breve{b}_{ip}=b_{ip}, \tag{31}$$

$$\widehat{a}_{ip}=a_{ip}+G_ib_{ip}, \tag{32}$$

$$\widehat{b}_{ip}=b_{ip}, \tag{33}$$

$$\breve{a}_{ip}^{+}=a_{ip}^{+}+G_ib_{ip}^{+}, \tag{34}$$

$$\breve{b}_{ip}^{+}=b_{ip}^{+}, \tag{35}$$

$$\widehat{a}_{ip}^{+}=a_{ip}^{+}-G_ib_{ip}^{+}, \tag{36}$$

$$\widehat{b}_{ip}^{+}=b_{ip}^{+}, \tag{37}$$

які відіграють суттєву роль в наступному застосуванні методу [1]. Тут G_i є невідомими константами.

Введемо таке позначення середнього значення довільного оператора A:

$$\langle A\rangle=\mathrm{Sp}(\rho A). \tag{38}$$

Sp означає слід оператора. Застосовуючи співвідношення для двох довільних операторів A та B:

$$\mathrm{Sp}(AB)=\mathrm{Sp}(BA), \tag{39}$$

можна знайти наступні тотожності для добутків трьох операторів:

$$\langle ABC\rangle=\langle BC\widehat{A}\rangle=\langle\breve{C}AB\rangle. \tag{40}$$

Внаслідок самоспряженості статистичного оператора системи ρ безпосередньо з (38) та (39) отримаємо:

$$\langle a_{ip}^{+}\rangle=\langle a_{ip}\rangle^{+}=\overline{\langle a_{ip}\rangle}, \tag{41}$$

де рискою зверху ми позначили операцію комплексного спряження. Співвідношення (40) між кореляційними функціями можна використати для знаходження самих кореляційних функцій. Матимемо

$$\langle a_{ip}b_{iq}b_j\rangle=\langle b_{iq}b_ja_{ip}\rangle+G_i\langle b_{iq}b_jb_{ip}\rangle=\langle b_ja_{ip}b_{iq}\rangle+ + G_i\langle b_jb_{ip}b_{iq}\rangle=\langle a_{ip}b_{iq}b_j\rangle+G_i\langle b_{ip}b_{iq}b_j\rangle, \tag{42}$$

звідки отримаємо:

$$\langle b_{ip}b_{iq}b_j\rangle=0. \tag{43}$$

Аналогічно можна пересвідчитись, що середнє значення будь-якої комбінації добутку трьох операторів b чи b^+ дорівнює 0. Це є безпосереднім наслідком трикутності матриць розкладання. Далі маємо:

$$\langle a_{ip}a_{iq}b_j\rangle = \langle a_{iq}b_ja_{ip}\rangle + G_i\langle a_{iq}b_jb_{ip}\rangle = \\ = \langle a_{ip}a_{iq}b_j\rangle + G_i\langle b_{ip}a_{iq}b_j\rangle + G_i\langle a_{ip}b_{iq}b_j\rangle, \quad (44)$$

$$G_i\langle b_{ip}a_{iq}b_j\rangle + G_i\langle a_{ip}b_{iq}b_j\rangle = 0. \quad (45)$$

Використовуючи решту співвідношень

$$\langle a_{ip}b_{iq}a_j\rangle = \langle a_{ip}b_{iq}a_j\rangle + G_i\langle b_{ip}b_{iq}a_j\rangle + G_j\langle a_{ip}b_{iq}b_j\rangle, \quad (46)$$

$$G_i\langle b_{ip}b_{iq}a_j\rangle + G_j\langle a_{ip}b_{iq}b_j\rangle = 0, \quad (47)$$

$$\langle b_{ip}a_{iq}a_j\rangle = \langle b_{ip}a_{iq}a_j\rangle + G_i\langle b_{ip}b_{iq}a_j\rangle + G_j\langle b_{ip}a_{iq}b_j\rangle, \quad (48)$$

$$G_i\langle b_{ip}b_{iq}a_j\rangle + G_j\langle b_{ip}a_{iq}b_j\rangle = 0, \quad (49)$$

знаходимо:

$$\langle b_{ip}a_{iq}b_j\rangle = \langle a_{ip}b_{iq}b_j\rangle = \langle b_{ip}b_{iq}a_j\rangle = 0. \quad (50)$$

Аналогічно можна пересвідчитись, що середнє значення будь-якої комбінації добутку двох операторів b чи b^+ та одного оператора a чи a^+ дорівнює 0

$$-\langle a_{ip}a_{iq}a_j\rangle = \langle a_{iq}a_ja_{ip}\rangle = \langle a_{ip}a_{iq}a_j\rangle - G_i\langle b_{ip}a_{iq}a_j\rangle. \quad (51)$$

Звідси маємо:

$$\langle b_{ip}a_{iq}a_j\rangle = 2\frac{\langle a_{ip}a_{iq}a_j\rangle}{G_i} = \langle a_jb_{ip}a_{iq}\rangle = \langle a_{iq}a_jb_{ip}\rangle. \quad (52)$$

Аналогічно

$$\langle a_{ip}b_{iq}a_j\rangle = \langle b_{iq}a_ja_{ip}\rangle = \langle a_ja_{ip}b_{iq}\rangle = \\ = -2\frac{\langle a_ja_{ip}a_{iq}\rangle}{G_i} = -2\frac{\langle a_{ip}a_{iq}a_j\rangle}{G_i}, \quad (53)$$

$$\langle b_{ip}a_{iq}a_j^+\rangle = \langle a_j^+b_{ip}a_{iq}\rangle = \langle a_{iq}a_j^+b_{ip}\rangle = -\langle a_{ip}b_{iq}a_j^+\rangle = \\ = -\langle a_j^+a_{ip}b_{iq}\rangle = -\langle b_{iq}a_j^+a_{ip}\rangle = 2\frac{\langle a_{ip}a_{iq}a_j^+\rangle}{G_i}. \quad (54)$$

Нарешті, отримаємо:

$$\langle a_{ip}a_{iq}b_j\rangle = \langle a_{iq}b_ja_{ip}\rangle = \langle b_ja_{ip}a_{iq}\rangle = \langle a_{ip}a_{iq}b_j^+\rangle = \\ = \langle a_{iq}b_j^+a_{ip}\rangle = \langle b_j^+a_{ip}a_{iq}\rangle = 0. \quad (55)$$

Аналогічно, маємо:

$$\langle b_{iq}^+a_j^\pm a_{ip}^+\rangle = \langle a_{ip}^+b_{iq}^+a_j^\pm\rangle = \langle a_j^\pm a_{ip}^+b_{iq}^+\rangle = -\langle b_{ip}^+a_{iq}^+a_j^\pm\rangle = \\ = -\langle a_{iq}^+a_j^\pm b_{ip}^+\rangle = -\langle a_j^\pm b_{ip}^+a_{iq}^+\rangle = 2\frac{\langle a_{ip}^+a_{iq}^+a_j^\pm\rangle}{G_i}, \quad (56)$$

$$\langle a_{ip}^+a_{iq}^+b_j^+\rangle = \langle a_{iq}^+b_j^+a_{ip}^+\rangle = \langle b_j^+a_{ip}^+a_{iq}^+\rangle = \langle a_{ip}^+a_{iq}^+b_j\rangle = \\ = \langle a_{iq}^+b_ja_{ip}^+\rangle = \langle b_ja_{ip}^+a_{iq}^+\rangle = 0, \quad (57)$$

$$\langle a_{iq}a_j^\pm a_{ip}^+\rangle = \langle a_{ip}^+a_{iq}a_j^\pm\rangle + G_i\langle b_{ip}^+a_{iq}a_j^\pm\rangle, \quad (58)$$

$$\langle b_{ip}^+a_{iq}a_j^\pm\rangle = \frac{\langle a_j^\pm\rangle\delta_{pq} - 2\langle a_{ip}^+a_{iq}a_j^\pm\rangle}{G_i} = \langle a_j^\pm b_{ip}^+a_{iq}\rangle = \\ = \langle a_{iq}a_j^\pm b_{ip}^+\rangle = \langle a_j^\pm a_{iq}b_{ip}^+\rangle = \langle a_{iq}b_{ip}^+a_j^\pm\rangle = \langle b_{ip}^+a_j^\pm a_{iq}\rangle, \quad (59)$$

$$\langle a_{ip}^+a_j^\pm a_{iq}\rangle = \langle a_j^\pm a_{iq}a_{ip}^+\rangle - G_i\langle b_{iq}a_{ip}^+a_j^\pm\rangle, \quad (60)$$

$$\langle b_{iq}a_{ip}^+a_j^\pm\rangle = \frac{\langle a_j^\pm\rangle\delta_{pq} - 2\langle a_{ip}^+a_{iq}a_j^\pm\rangle}{G_i} = \langle a_j^\pm b_{iq}a_{ip}^+\rangle = \\ = \langle a_{ip}^+a_j^\pm b_{iq}\rangle = \langle a_j^\pm a_{ip}^+b_{iq}\rangle = \langle a_{ip}^+b_{iq}a_j^\pm\rangle = \langle b_{iq}a_j^\pm a_{ip}^+\rangle. \quad (61)$$

Нарешті, знаходимо:

$$\langle a_{ip}^+a_{iq}b_j^\pm\rangle = \langle a_{iq}b_j^\pm a_{ip}^+\rangle = \langle b_j^\pm a_{ip}^+a_{iq}\rangle = \\ = \langle a_{iq}a_{ip}^+b_j^\pm\rangle = \langle a_{ip}^+b_j^\pm a_{iq}\rangle = \langle b_j^\pm a_{iq}a_{ip}^+\rangle = 0. \quad (62)$$

Усереднюючи (153), отримуємо:

$$(K_{22p}^{(i)} + K_{22q}^{(i)} - \varepsilon_{ip} - \varepsilon_{iq})(\langle a_j\rangle\delta_{pq} - 2\langle a_{ip}^+a_{iq}a_j\rangle) = 0. \quad (63)$$

Оскільки $K_{22p}^{(i)} + K_{22q}^{(i)} \neq \varepsilon_{ip} + \varepsilon_{iq}$, то

$$\langle a_{ip}^+a_{iq}a_j\rangle = \langle a_j\rangle\frac{\delta_{pq}}{2}. \quad (64)$$

Аналогічно, маємо:

$$\langle a_ja_{ip}^+a_{iq}\rangle = \langle a_{iq}a_{ip}^+a_j\rangle = \langle a_ja_{iq}a_{ip}^+\rangle = \\ = \langle a_{ip}^+a_ja_{iq}\rangle = \langle a_{iq}a_ja_{ip}^+\rangle = \langle a_j\rangle\frac{\delta_{pq}}{2}, \quad (65)$$

$$\langle a_{ip}^+a_{iq}a_j^+\rangle = \langle a_{iq}a_{ip}^+a_j^+\rangle = \langle a_j^+a_{ip}^+a_{iq}\rangle = \langle a_j^+a_{iq}a_{ip}^+\rangle = \\ = \langle a_{ip}^+a_j^+a_{iq}\rangle = \langle a_{iq}a_j^+a_{ip}^+\rangle = \langle a_j^+\rangle\frac{\delta_{pq}}{2}. \quad (66)$$

Зовсім аналогічно можна отримати вирази для кореляційних функцій операторів частинок одного сорту для випадку, коли $q \neq p$:

$$\langle a_{ip}^+a_{iq}b_{ip}\rangle = \langle b_{ip}a_{ip}^+a_{iq}\rangle = \langle a_{iq}b_{ip}a_{ip}^+\rangle = -\langle a_{ip}^+b_{ip}a_{iq}\rangle = \\ = -\langle b_{ip}a_{iq}a_{ip}^+\rangle = -\langle a_{iq}a_{ip}^+b_{ip}\rangle = \frac{\langle a_{iq}\rangle}{G_i}, \quad (67)$$

$$\langle b_{ip}^{+} a_{iq} a_{ip} \rangle = \langle a_{ip} b_{ip}^{+} a_{iq} \rangle = \langle a_{iq} a_{ip} b_{ip}^{+} \rangle = -\langle b_{ip}^{+} a_{ip} a_{iq} \rangle = -\langle a_{iq} b_{ip}^{+} a_{ip} \rangle = -\langle a_{ip} a_{iq} b_{ip}^{+} \rangle = \frac{\langle a_{iq} \rangle}{G_i}, \tag{68}$$

$$\langle b_{ip}^{+} a_{iq}^{+} a_{ip} \rangle = \langle a_{ip} b_{ip}^{+} a_{iq}^{+} \rangle = \langle a_{iq}^{+} a_{ip} b_{ip}^{+} \rangle = -\langle b_{ip}^{+} a_{ip} a_{iq}^{+} \rangle = -\langle a_{iq}^{+} b_{ip}^{+} a_{ip} \rangle = -\langle a_{ip} a_{iq}^{+} b_{ip}^{+} \rangle = \frac{\langle a_{iq}^{+} \rangle}{G_i}, \tag{69}$$

$$\langle a_{ip}^{+} a_{iq}^{+} b_{ip} \rangle = \langle a_{iq}^{+} b_{ip} a_{ip}^{+} \rangle = \langle b_{ip} a_{ip}^{+} a_{iq}^{+} \rangle = -\langle a_{iq}^{+} a_{ip}^{+} b_{ip} \rangle = -\langle a_{ip}^{+} b_{ip} a_{iq}^{+} \rangle = -\langle b_{ip} a_{iq}^{+} a_{ip}^{+} \rangle = \frac{\langle a_{iq}^{+} \rangle}{G_i}, \tag{70}$$

$$\langle a_{ip}^{+} a_{ip} b_{iq} \rangle = \langle a_{ip} a_{ip}^{+} b_{iq} \rangle = \langle a_{ip} b_{iq} a_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{ip}^{+} b_{iq} a_{ip} \rangle = \langle b_{iq} a_{ip}^{+} a_{ip} \rangle = \langle b_{iq} a_{ip} a_{ip}^{+} \rangle = 0, \tag{71}$$

$$\langle a_{ip}^{+} a_{iq} b_{iq} \rangle = \langle b_{iq} a_{ip}^{+} a_{iq} \rangle = \langle a_{iq} b_{iq} a_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{iq} a_{ip}^{+} b_{iq} \rangle = \langle b_{iq} a_{iq} a_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{ip}^{+} b_{iq} a_{iq} \rangle = 0, \tag{72}$$

$$\langle a_{ip}^{+} b_{ip}^{+} a_{iq} \rangle = \langle b_{ip}^{+} a_{iq} a_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{iq} a_{ip}^{+} b_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{ip}^{+} a_{iq} b_{ip}^{+} \rangle = \langle b_{ip}^{+} a_{ip}^{+} a_{iq} \rangle = \langle a_{iq} b_{ip}^{+} a_{ip}^{+} \rangle = 0, \tag{73}$$

$$\langle a_{ip}^{+} a_{ip} b_{iq}^{+} \rangle = \langle a_{ip} a_{ip}^{+} b_{iq}^{+} \rangle = \langle a_{ip} b_{iq}^{+} a_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{ip}^{+} b_{iq}^{+} a_{ip} \rangle = \langle b_{iq}^{+} a_{ip}^{+} a_{ip} \rangle = \langle b_{iq}^{+} a_{ip} a_{ip}^{+} \rangle = 0, \tag{74}$$

$$\langle b_{ip}^{+} a_{iq} a_{iq} \rangle = \langle a_{iq} a_{iq} b_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{iq} b_{ip}^{+} a_{iq} \rangle = 0, \tag{75}$$

$$\langle b_{iq} a_{ip}^{+} a_{ip}^{+} \rangle = \langle a_{ip}^{+} a_{ip}^{+} b_{iq} \rangle = \langle a_{ip}^{+} b_{iq} a_{ip}^{+} \rangle = 0. \tag{76}$$

Вірними будуть також співвідношення, отримані з наведених співвідношень (67)–(76) заміною q на p і навпаки.

4. Співвідношення для центральних моментів розподілу

Структуру кореляцій корисно досліджувати для центральних моментів розподілу, оскільки наявність кореляції флуктуацій свідчить про наявність фазового переходу в системі [11]. Співвідношення для центральних моментів розподілу легко отримати, зробивши зсув операторів, а саме:

$$a_{ip} = \langle a_{ip} \rangle + \alpha_{ip}, \tag{77}$$

$$a_{ip}^{+} = \overline{\langle a_{ip} \rangle} + \alpha_{ip}^{+}. \tag{78}$$

Ось основні співвідношення:

$$\langle [\alpha_i, \alpha_j] \rangle = \langle [\alpha_i^{+}, \alpha_j] \rangle = \langle [\alpha_i^{+}, \alpha_j^{+}] \rangle = 0, \tag{79}$$

$$\langle [\alpha_{ip}, \alpha_{iq}]_{+} \rangle = -2\langle a_{ip} \rangle \langle a_{iq} \rangle, \tag{80}$$

$$\langle [\alpha_{ip}^{+}, \alpha_{iq}]_{+} \rangle = \delta_{pq} - 2\overline{\langle a_{ip} \rangle} \langle a_{iq} \rangle, \tag{81}$$

$$\langle [\alpha_{ip}^{+}, \alpha_{iq}^{+}]_{+} \rangle = -2\overline{\langle a_{ip} \rangle \langle a_{iq} \rangle}, \tag{82}$$

$$\langle [\alpha_j^{\pm}, \alpha_{ip}] \alpha_{iq} \rangle = \langle [\alpha_j^{\pm}, \alpha_{ip}^{+}] \alpha_{iq} \rangle = \langle \alpha_{ip} [\alpha_j^{\pm}, \alpha_{iq}] \rangle = \langle \alpha_{ip}^{+} [\alpha_j^{\pm}, \alpha_{iq}] \rangle = 0, \tag{83}$$

$$\langle [\alpha_{ip}, \alpha_{iq}]_{+} \alpha_j^{\pm} \rangle = \langle \alpha_j^{\pm} [\alpha_{ip}, \alpha_{iq}]_{+} \rangle = -2\langle a_{ip} \rangle \langle \alpha_{iq} \alpha_j^{\pm} \rangle - 2\langle a_{iq} \rangle \langle \alpha_{ip} \alpha_j^{\pm} \rangle, \tag{84}$$

$$\langle [\alpha_{ip}^{+}, \alpha_{iq}]_{+} \alpha_j^{\pm} \rangle = \langle \alpha_j^{\pm} [\alpha_{ip}^{+}, \alpha_{iq}]_{+} \rangle = -2\overline{\langle a_{ip} \rangle} \langle \alpha_{iq} \alpha_j^{\pm} \rangle - 2\langle a_{iq} \rangle \langle \alpha_{ip}^{+} \alpha_j^{\pm} \rangle, \tag{85}$$

$$\langle [\alpha_{ip}^{+}, \alpha_{iq}^{+}]_{+} \alpha_j^{\pm} \rangle = \langle \alpha_j^{\pm} [\alpha_{ip}^{+}, \alpha_{iq}^{+}]_{+} \rangle = -2\overline{\langle a_{ip} \rangle} \langle \alpha_{iq}^{+} \alpha_j^{\pm} \rangle - 2\overline{\langle a_{iq} \rangle} \langle \alpha_{ip}^{+} \alpha_j^{\pm} \rangle, \tag{86}$$

$$\langle \alpha_{iq} \alpha_{ip}^{+} \rangle = \langle \alpha_{ip}^{+} \alpha_{iq} \rangle = \frac{\delta_{pq}}{2} - \overline{\langle a_{ip} \rangle} \langle a_{iq} \rangle, \tag{87}$$

$$\langle \alpha_{iq} \alpha_{ip}^{+} \alpha_j^{\pm} \rangle = \langle \alpha_{ip}^{+} \alpha_{iq} \alpha_j^{\pm} \rangle = -\overline{\langle a_{ip} \rangle} \langle \alpha_{iq} \alpha_j^{\pm} \rangle - \langle a_{iq} \rangle \langle \alpha_{ip}^{+} \alpha_j^{\pm} \rangle. \tag{88}$$

5. Основні варіанти

Ми вже зазначали [1], що для кожної частинки можливі лише два різні стани. Це можуть бути стани з однаковими імпульсами та різними проекціями спіну або, навпаки, стани з різними імпульсами. Відтак, ми розглянемо 4 основні варіанти. Нагадаємо, що ми розглядаємо частинки, що підлягають електростатичній взаємодії з кулонівським потенціалом:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}. \tag{89}$$

Тут Q_1 та Q_2 – заряди частинок, що розташовані на відстані r, ε_0 – абсолютна діелектрична проникливість вакууму. Першому варіанту відповідають такі операторні хвильові функції частинок:

$$\Psi_j(\mathbf{r}_j) = \frac{e^{\frac{i\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}_j}{\hbar}}}{\sqrt{V}} (a_{j+} + a_{j-}), \tag{90}$$

$$\Psi_j^{+}(\mathbf{r}_j) = \frac{e^{\frac{-i\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}_j}{\hbar}}}{\sqrt{V}} (a_{j+}^{+} + a_{j-}^{+}). \tag{91}$$

$\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}_j$ означає скалярний добуток вектора імпульсу $\mathbf{p}_j$ та радіуса-вектора $\mathbf{r}_j$ частинки сорту j. a_{j+}^{+},

a_{j+} – оператори народження та знищення, що відповідають проекції спіну $+\frac{1}{2}\hbar$, і a^+_{j-}, a_{j-} – оператори народження та знищення, що відповідають проекції спіну $-\frac{1}{2}\hbar$. $\hbar$ – константа Планка, а операторні хвильові функції частинок нормовані на об'єм V. Для першого варіанта отримаємо гамільтоніан взаємодії у вигляді:

$$H_{12} = I(a^+_{1+}+a^+_{1-})(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})(a_{1+}+a_{1-}). \tag{92}$$

Константа взаємодії

$$I = \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) = \frac{3Q_1Q_2}{16\pi\varepsilon_0 R}, \tag{93}$$

де R – радіус кулі, що має об'єм V. Тут і далі для обчислення інтегралів здійснено перехід до сферичних координат, а інтегрується по кулі з радіусом R. Звідси ми отримаємо такі вирази для операторів:

$$b_{1+} = b_{1-} = I(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})(a_{1+}+a_{1-}), \tag{94}$$

$$b_{2+} = b_{2-} = I(a^+_{1+}+a^+_{1-})(a_{2+}+a_{2-})(a_{1+}+a_{1-}), \tag{95}$$

$$b^+_{1+} = b^+_{1-} = I(a^+_{1+}+a^+_{1-})(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-}), \tag{96}$$

$$b^+_{2+} = b^+_{2-} = I(a^+_{1+}+a^+_{1-})(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{1+}+a_{1-}). \tag{97}$$

З трикутності матриць розкладання випливає, що середнє значення всіх цих операторів рівне 0 [1]. Звідси, враховуючи (64), (66), отримаємо такі співвідношення для середніх значень операторів народження та знищення:

$$\langle a_{1-}\rangle = -\langle a_{1+}\rangle, \tag{98}$$

$$\langle a_{2-}\rangle = -\langle a_{2+}\rangle, \tag{99}$$

$$\langle a^+_{1-}\rangle = -\langle a^+_{1+}\rangle, \tag{100}$$

$$\langle a^+_{2-}\rangle = -\langle a^+_{2+}\rangle. \tag{101}$$

В другому варіанті розглянемо такі операторні хвильові функції частинок:

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{V}}\left(e^{\frac{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a_{1\mathbf{p}_1} + e^{\frac{i\vec{q}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a_{1\vec{q}_1}\right), \tag{102}$$

$$\Psi^+_1(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{V}}\left(e^{\frac{-i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a^+_{1\mathbf{p}_1} + e^{\frac{-i\mathbf{q}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a^+_{1\mathbf{q}_1}\right), \tag{103}$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}_2) = \frac{e^{\frac{i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}}}{\sqrt{V}}(a_{2+}+a_{2-}), \tag{104}$$

$$\Psi^+_2(\mathbf{r}_2) = \frac{e^{\frac{-i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}}}{\sqrt{V}}(a^+_{2+}+a^+_{2-}). \tag{105}$$

Відтак, у другому варіанті перша частинка має два різні стани з різними імпульсами $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{q}_1$. Для оператора взаємодії отримаємо:

$$\begin{aligned}H_{12} = {}& I\{a^+_{1\mathbf{p}_1}(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})a_{1\mathbf{p}_1} + \\ &+ a^+_{1\mathbf{q}_1}(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})a_{1\mathbf{q}_1}\} + \\ &+ I_1 a^+_{1\mathbf{p}_1}(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})a_{1\mathbf{q}_1} + \\ &+ I_2 a^+_{1\mathbf{q}_1}(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})a_{1\mathbf{p}_1},\end{aligned} \tag{106}$$

$$\begin{aligned}I_1 = {}& \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\Phi(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)e^{\frac{i(\mathbf{q}_1-\mathbf{p}_1)\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} = \\ &= \frac{2\pi Q_1Q_2}{\varepsilon_0\Delta_1^5 V^2}\{1-\cos(\Delta_1 R)\}\{\sin(\Delta_1 R) - \\ &- \Delta_1 R\cos(\Delta_1 R)\},\end{aligned} \tag{107}$$

$$I_2 = \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\Phi(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)e^{\frac{i(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} = I_1, \tag{108}$$

$$\Delta_1 = \frac{|\mathbf{q}_1-\mathbf{p}_1|}{\hbar}. \tag{109}$$

Далі знаходимо:

$$b_{1\mathbf{q}_1} = (a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})(Ia_{1\mathbf{q}_1}+I_1a_{1\mathbf{p}_1}), \tag{110}$$

$$b_{1\mathbf{p}_1} = (a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-})(Ia_{1\mathbf{p}_1}+I_1a_{1\mathbf{q}_1}), \tag{111}$$

$$b^+_{1\mathbf{q}_1} = (Ia^+_{1\mathbf{q}_1}+I_1a^+_{1\mathbf{p}_1})(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-}), \tag{112}$$

$$b^+_{1\mathbf{p}_1} = (Ia^+_{1\mathbf{p}_1}+I_1a^+_{1\mathbf{q}_1})(a^+_{2+}+a^+_{2-})(a_{2+}+a_{2-}), \tag{113}$$

$$\begin{aligned}b_{2+} = b_{2-} = {}& \{I(a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{p}_1}+a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ &+ I_1(a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{q}_1}+a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{p}_1})\}(a_{2+}+a_{2-}),\end{aligned} \tag{114}$$

$$\begin{aligned}b^+_{2+} = b^+_{2-} = {}& (a^+_{2+}+a^+_{2-})\{I(a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{p}_1}+a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ &+ I_1(a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{q}_1}+a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{p}_1})\}.\end{aligned} \tag{115}$$

З (114), (115) з урахуванням (64), (66) отримаємо:

$$\langle a_{2-}\rangle = -\langle a_{2+}\rangle, \tag{116}$$

$$\langle a^+_{2-}\rangle = -\langle a^+_{2+}\rangle. \tag{117}$$

З урахуванням (64), рівняння (110) та (111) дають:

$$I\langle a_{1\mathbf{q}_1}\rangle + I_1\langle a_{1\mathbf{p}_1}\rangle = 0, \tag{118}$$

$$I\langle a_{1\mathbf{p}_1}\rangle + I_1\langle a_{1\mathbf{q}_1}\rangle = 0. \tag{119}$$

Звідси випливає:

$$\{1-\cos(\Delta_1 R)\}\{\Delta_1 R\cos(\Delta_1 R)-\sin(\Delta_1 R)\} = \frac{(\Delta_1 R)^5}{6}. \tag{120}$$

Розв'язуючи останнє рівняння, отримуємо таке:

$$\Delta_1 R = \mathrm{C} = 1{,}3680427635. \tag{121}$$

Це відповідає умові

$$I_1 = -I, \tag{122}$$

а отже

$$\langle a_{1\mathbf{q}_1} \rangle = \langle a_{1\mathbf{p}_1} \rangle. \tag{123}$$

Аналогічно

$$\langle a^+_{1\mathbf{q}_1} \rangle = \langle a^+_{1\mathbf{p}_1} \rangle. \tag{124}$$

Третій варіант отримується з другого варіанта заміною індексів сортів частинок та Δ_1 на Δ_2, де

$$\Delta_2 = \frac{|\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2|}{\hbar}. \tag{125}$$

Для четвертого варіанта беремо операторні хвильові функції у вигляді:

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{V}}(e^{\frac{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a_{1\mathbf{p}_1} + e^{\frac{i\mathbf{q}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a_{1\mathbf{q}_1}), \tag{126}$$

$$\Psi_1^+(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{V}}(e^{\frac{-i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a^+_{1\mathbf{p}_1} + e^{\frac{-i\mathbf{q}_1\cdot\mathbf{r}_1}{\hbar}} a^+_{1\mathbf{q}_1}), \tag{127}$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}}(e^{\frac{i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} a_{2\mathbf{p}_2} + e^{\frac{i\mathbf{q}_2\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} a_{2\mathbf{q}_2}), \tag{128}$$

$$\Psi_2^+(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}}(e^{\frac{-i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} a^+_{2\mathbf{p}_2} + e^{\frac{-i\mathbf{q}_2\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} a^+_{2\mathbf{q}_2}). \tag{129}$$

Для оператора взаємодії отримаємо:

$$\begin{aligned} H_{12} = I\big(&a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{q}_1} + \\ &+ a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{q}_1}\big) + \\ &+ I_1(a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{q}_1} + a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ &+ I_2(a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{p}_1}) + \\ &+ I_3(a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ &+ I_4(a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ &+ I_5 a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{q}_1} + I_6 a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{p}_1} + \\ &+ I_7 a^+_{1\mathbf{q}_1} a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{p}_2} a_{1\mathbf{p}_1} + I_8 a^+_{1\mathbf{p}_1} a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{q}_2} a_{1\mathbf{q}_1}. \end{aligned} \tag{130}$$

Константи взаємодії:

$$\begin{aligned} I_3 &= \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{\frac{i(\mathbf{q}_2-\mathbf{p}_2)\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} = \\ &= \frac{2\pi Q_1 Q_2}{\varepsilon_0 \Delta_2^5 V^2}\{1 - \cos(\Delta_2 R)\}\{\sin(\Delta_2 R) - \\ &- \Delta_2 R \cos(\Delta_2 R)\}, \end{aligned} \tag{131}$$

$$I_4 = \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{\frac{i(\mathbf{p}_2-\mathbf{q}_2)\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} = I_3, \tag{132}$$

$$\begin{aligned} I_5 &= \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i\frac{(\mathbf{q}_1-\mathbf{p}_1)\cdot\mathbf{r}_1 + (\mathbf{p}_2-\mathbf{q}_2)\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} = \\ &= \frac{2\pi Q_1 Q_2}{\varepsilon_0 \Delta_1^2 |\boldsymbol{\Delta}_1 - \boldsymbol{\Delta}_2|^3 V^2}\{1 - \cos(\Delta_1 R)\} \times \\ &\times \{\sin(|\boldsymbol{\Delta}_1 - \boldsymbol{\Delta}_2| R) - |\boldsymbol{\Delta}_1 - \boldsymbol{\Delta}_2| \times \\ &\times R\cos(|\boldsymbol{\Delta}_1 - \boldsymbol{\Delta}_2| R)\}. \end{aligned} \tag{133}$$

Тут позначено:

$$\boldsymbol{\Delta}_i = \frac{\mathbf{q}_i - \mathbf{p}_i}{\hbar}. \tag{134}$$

$$\begin{aligned} I_6 &= \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \\ &\times e^{i\frac{(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)\cdot\mathbf{r}_1 + (\mathbf{q}_2-\mathbf{p}_2)\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} = I_5, \end{aligned} \tag{135}$$

$$\begin{aligned} I_7 &= \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i\frac{(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)\cdot\mathbf{r}_1 + (\mathbf{p}_2-\mathbf{q}_2)\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} = \\ &= \frac{2\pi Q_1 Q_2}{\varepsilon_0 \Delta_1^2 |\boldsymbol{\Delta}_1 + \boldsymbol{\Delta}_2|^3 V^2}\{1 - \cos(\Delta_1 R)\} \times \\ &\times \{\sin(|\boldsymbol{\Delta}_1 + \boldsymbol{\Delta}_2| R) - |\boldsymbol{\Delta}_1 + \boldsymbol{\Delta}_2| \times \\ &\times R\cos(|\boldsymbol{\Delta}_1 + \boldsymbol{\Delta}_2| R)\}, \end{aligned} \tag{136}$$

$$\begin{aligned} I_8 &= \frac{1}{2V^2}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \\ &\times e^{i\frac{(\mathbf{q}_1-\mathbf{p}_1)\cdot\mathbf{r}_1 + (\mathbf{q}_2-\mathbf{p}_2)\cdot\mathbf{r}_2}{\hbar}} = I_7. \end{aligned} \tag{137}$$

З гамільтоніана знаходимо:

$$\begin{aligned} b_{1\mathbf{q}_1} &= (a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{p}_2} + a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{q}_2})(I a_{1\mathbf{q}_1} + I_2 a_{1\mathbf{p}_1}) + \\ &+ a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{q}_2}(I_3 a_{1\mathbf{q}_1} + I_6 a_{1\mathbf{p}_1}) + \\ &+ a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{p}_2}(I_4 a_{1\mathbf{q}_1} + I_7 a_{1\mathbf{p}_1}), \end{aligned} \tag{138}$$

$$\begin{aligned} b_{1\mathbf{p}_1} &= (a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{p}_2} + a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{q}_2})(I a_{1\mathbf{p}_1} + I_1 a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ &+ a^+_{2\mathbf{p}_2} a_{2\mathbf{q}_2}(I_3 a_{1\mathbf{p}_1} + I_8 a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ &+ a^+_{2\mathbf{q}_2} a_{2\mathbf{p}_2}(I_4 a_{1\mathbf{p}_1} + I_5 a_{1\mathbf{q}_1}), \end{aligned} \tag{139}$$

$$b_{2\mathbf{q}_2} = (a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{q}_1})(Ia_{2\mathbf{q}_2} + I_4a_{2\mathbf{p}_2}) + \\ + a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{q}_1}(I_1a_{2\mathbf{q}_2} + I_5a_{2\mathbf{p}_2}) + \\ + a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{p}_1}(I_2a_{2\mathbf{q}_2} + I_7a_{2\mathbf{p}_2}), \quad (140)$$

$$b_{2\mathbf{p}_2} = (a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{q}_1})(Ia_{2\mathbf{p}_2} + I_3a_{2\mathbf{q}_2}) + \\ + a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{q}_1}(I_1a_{2\mathbf{p}_2} + I_8a_{2\mathbf{q}_2}) + \\ + a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{p}_1}(I_2a_{2\mathbf{p}_2} + I_6a_{2\mathbf{q}_2}), \quad (141)$$

$$b^+_{1\mathbf{q}_1} = (Ia^+_{1\mathbf{q}_1} + I_1a^+_{1\mathbf{p}_1})(a^+_{2\mathbf{p}_2}a_{2\mathbf{p}_2} + a^+_{2\mathbf{q}_2}a_{2\mathbf{q}_2}) + \\ + (I_3a^+_{1\mathbf{q}_1} + I_8a^+_{1\mathbf{p}_1})a^+_{2\mathbf{p}_2}a_{2\mathbf{q}_2} + \\ + (I_4a^+_{1\mathbf{q}_1} + I_5a^+_{1\mathbf{p}_1})a^+_{2\mathbf{q}_2}a_{2\mathbf{p}_2}, \quad (142)$$

$$b^+_{1\mathbf{p}_1} = (Ia^+_{1\mathbf{p}_1} + I_2a^+_{1\mathbf{q}_1})(a^+_{2\mathbf{p}_2}a_{2\mathbf{p}_2} + a^+_{2\mathbf{q}_2}a_{2\mathbf{q}_2}) + \\ + (I_3a^+_{1\mathbf{p}_1} + I_6a^+_{1\mathbf{q}_1})a^+_{2\mathbf{p}_2}a_{2\mathbf{q}_2} + \\ + (I_4a^+_{1\mathbf{p}_1} + I_7a^+_{1\mathbf{q}_1})a^+_{2\mathbf{q}_2}a_{2\mathbf{p}_2}, \quad (143)$$

$$b^+_{2\mathbf{q}_2} = (Ia^+_{2\mathbf{q}_2} + I_3a^+_{2\mathbf{p}_2})(a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ + (I_1a^+_{2\mathbf{q}_2} + I_8a^+_{2\mathbf{p}_2})a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{q}_1} + \\ + (I_2a^+_{2\mathbf{q}_2} + I_6a^+_{2\mathbf{p}_2})a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{p}_1}, \quad (144)$$

$$b^+_{2\mathbf{p}_2} = (Ia^+_{2\mathbf{p}_2} + I_4a^+_{2\mathbf{q}_2})(a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{p}_1} + a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{q}_1}) + \\ + (I_1a^+_{2\mathbf{p}_2} + I_5a^+_{2\mathbf{q}_2})a^+_{1\mathbf{p}_1}a_{1\mathbf{q}_1} + \\ + (I_2a^+_{2\mathbf{p}_2} + I_7a^+_{2\mathbf{q}_2})a^+_{1\mathbf{q}_1}a_{1\mathbf{p}_1}. \quad (145)$$

Як і вище, маємо:

$$\{1-\cos(\Delta_i R)\}\{\Delta_i R\cos(\Delta_i R)-\sin(\Delta_i R)\} = \frac{(\Delta_i R)^5}{6}, \quad (146)$$

$$\Delta_2 R = \Delta_1 R = C = 1{,}3680427635. \quad (147)$$

Бачимо, що R є певним характерним радіусом, величина якого є зворотно-пропорційною модулю від різниці векторів двох можливих імпульсів частинок. Ця різниця виявляється однаковою за модулем для обох частинок. Остаточно маємо:

$$I_3 = I_1 = -I, \quad (148)$$

$$\langle a_{i\mathbf{q}_i}\rangle = \langle a_{i\mathbf{p}_i}\rangle, \quad (149)$$

$$\langle a^+_{i\mathbf{q}_i}\rangle = \langle a^+_{i\mathbf{p}_i}\rangle. \quad (150)$$

6. Деякі висновки

Бачимо, що ПАМ є ефективним для знаходження кореляційних функцій третього порядку. Завдяки результатам (64) та (66) в третьому порядку ми отримали також співвідношення для середніх значень операторів народження та знищення в залежності від форми оператора взаємодії. Відтак, існує своєрідне переплітання величин вищих та нижчих порядків, яке дозволяє знайти величини, які раніше залишились невизначеними. З другого боку, ми бачили як отримана в першому порядку рівність 0 середніх значень операторів базису розкладання b дала результат в третьому порядку кореляційних функцій. А отримані в третьому порядку співвідношення для кореляційних функцій з участю тих же операторів базису розкладання дадуть відповідний ефект в п'ятому порядку кореляційних функцій. Таким чином, є підстави вважати, що поступово будуть знайдені всі кореляційні функції нижчих порядків, які необхідні для отримання середніх значень фізичних величин кулонівської пари. Крім того, отримані в другому порядку значення для нормальних функцій розподілу частинок дали можливість визначити основні варіанти форм оператора взаємодії частинок, в залежності від комбінацій можливих значень імпульсів та проекцій спіну цих частинок. Насамкінець, зазначимо, що в останньому варіанті, як і в двох попередніх, ми не розглядаємо питання про те, якими є проекції спіну частинок для різних можливих станів з різними імпульсами. Вони можуть бути як однаковими, так і різними! Лише стани з однаковими імпульсами вимагають відмінності проекцій спіну для того, щоб ці стани були різними станами відповідних частинок. Цей дивний висновок є наслідком того, що кулонівська взаємодія не залежить від спіну. Відтак, це питання вимагає додаткового дослідження.

Бачимо, що вимальовується чітка технологічна схема розрахунків у будь-якому порядку. Спочатку знаходимо рівняння руху для операторів, з яких за допомогою виразів для комутаторів чи антикомутаторів отримуємо рівняння для самих операторів певного порядку. Далі, використовуючи (40), знаходимо співвідношення для кореляційних функцій та для центральних моментів розподілу, що не залежать від форми оператора взаємодії, доповнюючи їх співвідношеннями, що є наслідком отриманих перед тим рівнянь для операторів. Крім того, з отриманих в нижчих порядках співвідношень для кореляційних функцій за участю b-операторів базису розкладання, знаходимо нові співвідношення для відповідних кореляційних функцій за участю безпосередньо операторів народження та знищення частинок. Нарешті, розглядаємо відповідні співвідношення, що випливають з явних виразів для конкретних форм оператора взаємодії. Підвищення порядку кореляційних функцій не змінює цю загальну схему розрахунків, а лише збільшує технічні ускладнення, викликані зростанням кількості співвідношень, які необхідно розглянути, та рівнянь, які необхідно розв'язати. Але для кожного порядку є своя специфіка, пов'язана з фізичним значенням відповідних кореляційних функцій. Наприклад, середнє значення енергії взаємодії визначається кореляційними функціями четвертого порядку.

ДОДАТОК

Розглянемо, як з рівнянь руху для операторів можна вивести рівняння для самих операторів третього порядку. Наприклад, враховуючи те, що

$$[a_{ip}^+, a_{iq}]_+ a_j = a_j \delta_{pq}, \tag{151}$$

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

$$[a_{ip}^+, b_{iq}]_+ a_j = [b_{ip}^+, a_{iq}]_+ a_j. \tag{152}$$

Далі, беручи повторно комутатор рівняння (152) з гамільтоніаном, отримуємо:

$$2[b_{ip}^+, b_{iq}]_+ a_j = ([a_{ip}^+, b_{iq}]_+ - [b_{ip}^+, a_{iq}]_+) b_j + \\ + (K_{22p}^{(i)} + K_{22q}^{(i)} - \varepsilon_{ip} - \varepsilon_{iq})[a_{ip}^+, b_{iq}]_+ a_j. \tag{153}$$

Аналогічно отримаємо ще рівняння:

$$[a_{ip}^+, a_{iq}]_+ a_j^+ = a_j^+ \delta_{pq}, \tag{154}$$

$$[a_{ip}^+, b_{iq}]_+ a_j^+ = [b_{ip}^+, a_{iq}]_+ a_j^+, \tag{155}$$

$$2[b_{ip}^+, b_{iq}]_+ a_j^+ = ([b_{ip}^+, a_{iq}]_+ - [a_{ip}^+, b_{iq}]_+) b_j^+ + \\ + (K_{22p}^{(i)} + K_{22q}^{(i)} - \varepsilon_{ip} - \varepsilon_{iq})[a_{ip}^+, b_{iq}]_+ a_j^+, \tag{156}$$

$$a_j [a_{ip}^+, a_{iq}]_+ = a_j \delta_{pq}, \tag{157}$$

$$a_j [a_{ip}^+, b_{iq}]_+ = a_j [b_{ip}^+, a_{iq}]_+, \tag{158}$$

$$2a_j [b_{ip}^+, b_{iq}]_+ = b_j([a_{ip}^+, b_{iq}]_+ - [b_{ip}^+, a_{iq}]_+) + \\ + (K_{22p}^{(i)} + K_{22q}^{(i)} - \varepsilon_{ip} - \varepsilon_{iq}) a_j [a_{ip}^+, b_{iq}]_+, \tag{159}$$

$$a_j^+ [a_{ip}^+, a_{iq}]_+ = a_j^+ \delta_{pq}, \tag{160}$$

$$a_j^+ [a_{ip}^+, b_{iq}]_+ = a_j^+ [b_{ip}^+, a_{iq}]_+, \tag{161}$$

$$2a_j^+ [b_{ip}^+, b_{iq}]_+ = b_j^+([b_{ip}^+, a_{iq}]_+ - [a_{ip}^+, b_{iq}]_+) + \\ + (K_{22p}^{(i)} + K_{22q}^{(i)} - \varepsilon_{ip} - \varepsilon_{iq}) a_j^+ [a_{ip}^+, b_{iq}]_+, \tag{162}$$

$$a_{ip}^+ [a_{iq}, a_j] = 0, \tag{163}$$

$$a_{ip}^+ [b_{iq}, a_j] = -a_{ip}^+ [a_{iq}, b_j], \tag{164}$$

$$2a_{ip}^+ [b_{iq}, b_j] = b_{ip}^+([a_{iq}, b_j] + [b_{iq}, a_j]) + \\ + (\varepsilon_j - \varepsilon_{iq} + K_{22q}^{(i)} - K_{22}^{j}) a_{ip}^+ [a_{iq}, b_j], \tag{165}$$

$$a_{ip}^+ [a_{iq}, a_j^+] = 0, \tag{166}$$

$$a_{ip}^+ [b_{iq}, a_j^+] = a_{ip}^+ [a_{iq}, b_j^+], \tag{167}$$

$$2a_{ip}^+ [b_{iq}, b_j^+] = b_{ip}^+([a_{iq}, b_j^+] - [b_{iq}, a_j^+]) + \\ + (K_{22q}^{(i)} + K_{22}^{(j)} - \varepsilon_{iq} - \varepsilon_j) a_{ip}^+ [a_{iq}, b_j^+], \tag{168}$$

$$[a_{ip}^+, a_j] a_{iq} = 0, \tag{169}$$

$$[b_{ip}^+, a_j] a_{iq} = [a_{ip}^+, b_j] a_{iq}, \tag{170}$$

$$2[b_{ip}^+, b_j] a_{iq} = ([a_{ip}^+, b_j] - [b_{ip}^+, a_j]) b_{iq} + \\ + (K_{22p}^{(i)} - \varepsilon_{ip} + K_{22}^{(j)} - \varepsilon_j)[a_{ip}^+, b_j] a_{iq}, \tag{171}$$

$$[a_{iq}, a_j^+] a_{ip}^+ = 0, \tag{172}$$

$$[b_{iq}, a_j^+] a_{ip}^+ = [a_{iq}, b_j^+] a_{ip}^+, \tag{173}$$

$$2[b_{iq}, b_j^+] a_{ip}^+ = ([a_{iq}, b_j^+] - [b_{iq}, a_j^+]) b_{ip}^+ + \\ + (K_{22q}^{(i)} + K_{22}^{(j)} - \varepsilon_{iq} - \varepsilon_j)[b_{iq}, a_j^+] a_{ip}^+. \tag{174}$$

І так далі, і тому подібні рівняння...

1. В.І. Васьківський. Кореляційні функції кулонівської пари. *УФЖ* **60** (11), 1156 (2015).
2. М.Ф. Сарры. Аналитические методы вычисления корреляционных функций в квантовой статистической физике. *УФН* **161** (11), (1991).
3. А.И. Ахиезер, В.В. Красильников и др. Теория сверхтекучей ферми-жидкости. *УФН* **163** (2), (1993).
4. A.I. Akhiezer, V.V. Krasil'nikov, S.V. Peletminskii, A.A. Yatsenko. *Phys. Rep.* **245**, 1 (1994).
5. А.И. Ахиезер, А.А. Исаев, С.В. Пелетминский и др. *ЖЭТФ* **112**, 3 (1997).
6. В.Р. Шагинян, М.Я. Амусья, К.Г. Попов. *УФН* **177** (6), 585 (2007).
7. В.И. Белявский, Ю.В. Копаев. *УФН* **176** (5), 457 (2006).
8. V.O. Krasnov. Fermion spectrum of Bose–Fermi–Hubbard model in the phase with Bose–Einstein condensate. *Ukr. J. Phys.* **60** (5), 443 (2015).

9. I. Bariakhtar, A. Nazarenko. A model for $dx_2 - y_2$ superconductivity in the strongly correlated fermionic system. *Ukr. J. Phys.* **59** (5), 487 (2014).
10. Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Боголюбов (мл.). *Введение в квантовую статистическую механику* (Наука, 1984).
11. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. *Флуктуационная теория фазовых переходов* (Наука, 1981).

Одержано 18.02.15

V.I. Vaskivskyi (В.І. Васьківський)

THIRD-ORDER CORRELATION FUNCTIONS FOR A COULOMB PAIR

S u m m a r y

Third-order correlation functions for two particles with the electrostatic interaction have been obtained for the first time using the direct algebraic method. The main relations for the correlation functions that do not depend on the explicit form of the interaction potential between particles, as well as the relations that appear for four specific forms of the interaction operator, are considered.