

(в отсутствие обменных эффектов остаётся лишь первое слагаемое). Это выражение (и соответствующую ф-лу для ф-ций распределения) используют в приложениях метода С. п. к термодинамике и кинетике.

Одночастичную волновую ф-цию  $\psi_\alpha$  выбирают в методе С. п. из условия макс. близости выражений (1), (2) к точной волновой ф-ции системы. С этой целью используют вариационный принцип, требующий минимума энергии системы  $\mathcal{E} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$  при условии  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ , где

$$H = \sum_i T(q_i) + (1/2) \sum_{i \neq j} V(q_i, q_j), \quad (4)$$

$H$  — гамильтониан системы,  $T$  — сумма кинетич. энергии и внеш. поля,  $V$  — взаимодействие между частицами,  $i, j = 1, 2, \dots, N$ . Волновая ф-ция (1) приводит к ур-нию Хартри для  $\psi_\alpha$ :

$$(T+W)\psi_\alpha = \epsilon_\alpha \psi_\alpha, \quad (5)$$

включающему С. п.

$$W(q) = W_1(q) = \int dq' R(q, q') V(q, q').$$

Волновая ф-ция (2) приводит к ур-нию Хартри — Фока, имеющему вид (5) с  $W = W_1 \pm W_2$ , где обменный член  $W_2$  определяется соотношением

$$W_2(q)\psi_\alpha(q) = \int dq' R(q, q') V(q, q') \psi_\alpha(q').$$

Через одночастичные энергии  $\epsilon_\alpha$  выражается полная энергия системы

$$\mathcal{E} = \sum_\alpha \epsilon_\alpha n_\alpha - C, \quad C = (1/2) \int dq dq' V(q, q') [R(q, q) R(q', q') \pm R(q, q') R(q', q)].$$

Согласно вариационному принципу эта величина всегда больше истинного значения энергии.

Величина  $W_1$  имеет простой смысл ср. поля частиц системы, действующего на данную частицу, а  $W_2$  ведёт к увеличению (уменьшению) вероятности сближения двух бозе-(ферми)-частиц, изменяя соответствующим образом их взаимодействие. Самосогласованному характеру величины  $W$  отвечает зависимость матрицы плотности (3) от решений ур-ния (5), к-рое становится нелинейным и может поэтому иметь более одного набора решений. Так, при выполнении нек-рых условий возможно сосуществование двух решений ур-ния (5), отвечающих однородному и неоднородному состояниям системы, каждое из к-рых устойчиво в своей области плотностей и темп-р. Это соответствует фазовому переходу со спонтанным нарушением трансляц. симметрий и с появлением волн зарядовой плотности.

В др. формулировке метода С. п. заменяют гамильтониан (4) выражением, к-рое соответствует одночастичной картине. В методе вторичного квантования, где

$$H = \int dq \psi^\dagger(q) T \psi(q) + (1/2) \int dq dq' V(q, q') A(q, q'),$$

$$A(q, q') = \psi^\dagger(q) \psi^\dagger(q') \psi(q') \psi(q),$$

эту картину нарушает входящий во взаимодействие оператор  $A$ , содержащий четыре операторные ф-ции вместо нужных двух. Модифицированный гамильтониан, отвечающий методу С. п., соответствует замене в  $A$  комбинаций  $\psi^\dagger \psi$  их ср. значениями (матрицами плотности):

$$A \rightarrow 2[R(q', q') \psi^\dagger(q) \psi(q) \pm R(q, q') \psi^\dagger(q') \psi(q')] - [R(q, q) R(q', q') \pm R(q, q') R(q', q)], \quad (6)$$

и имеет вид

$$H_0 = \int dq \psi^\dagger(q) (T+W) \psi(q) - C.$$

Это выражение приводит к ур-нию Хартри — Фока (5) и в то же время реализует минимум величины  $\langle (H - H_0)^2 \rangle$ , что и соответствует методу С. п. как наилучшему из одночастичных способов описания.

Применения метода. Простейший объект приложения метода С. п. — бесконечная однородная система взаимодействующих по закону Кулона ферми-частиц с массой  $m$ , зарядом  $e$  и спином  $1/2$  (электронов) в присутствии однородного компенсирующего фона противоположного знака заряда. В методе С. п. энергия такой системы в единице объёма равна  $\hbar^2 p_0^3 / 10\pi^2 m - e^2 p_0^4 / 4\pi^2$ , где  $p_0 = (3\pi^2 n)^{1/3}$ ,  $n$  — плотность числа частиц, первый член — кинетическая, второй — обменная энергия. Этот результат используют для упрощения интегро-дифференц. ур-ния Хартри — Фока (5), заменяя его дифференц. ур-нием Хартри — Фока — Слэтера, где  $W_2 = -e^2 [3\pi^2 n(r)]^{1/2} / \pi$ ,  $n(r) = \sum_\alpha n_\alpha |\psi_\alpha|^2$  — локальное значение плотности числа частиц.

Др. упрощённый вариант метода С. п. является метод Томаса — Ферми (квазиклассич. приближение к методу С. п.), применимый к слабо неоднородным системам, где ср. расстояние между частицами меньше характерной длины, на к-рой заметно меняется плотность и др. параметры системы. В методе Томаса — Ферми используют выражения, справедливые для однородной системы, относя их в каждой точке к соответствующему локальному значению плотности. Этот метод используют для описания тяжёлых атомов, вещества в экстремальных условиях высоких давлений или темп-р и др. Применяют и иные, более частные способы упрощения метода С. п. (напр., в теории атома часто используют усреднение С. п. по углам, упрощающее отделение угл. переменных).

Метод С. п. находит применение в физике атома и молекулы, ядерной физике, физике конденсированных состояний вещества, физике плазмы и др. областях науки. Часто он даёт достаточно точное описание системы мн. частиц. Это относится, в частности, к атомно-молекулярной физике и теоретич. спектроскопии, где метод С. п. применяют особенно широко благодаря относительно малому вкладу корреляц. эффектов. Напр., в атоме He (простейшей системе мн. частиц) этот вклад составляет  $\sim 1,5\%$  от полной энергии электронной оболочки.

К числу др. важных применений метода С. п. в теории систем мн. частиц относятся описание равновесных и кинетич. свойств плазмы в бесстолкновит. режиме, *Ландяу теория фазовых переходов 2-го рода* и др.

**Обобщения метода.** Существует ряд обобщений метода С. п., приспособленных для частичного описания корреляц. эффектов. Так, при необходимости учёта парных корреляций сверхпроводящего типа используют модифицированный гамильтониан (6), где заменяют ср. значения комбинации  $\psi\psi$ ,  $\psi^\dagger\psi^\dagger$ , что приводит к ур-ниям Хартри — Фока — Боголюбова. Такой подход применяют в теории сверхпроводимости и в теории атомного ядра. Для описания многочастичных (дальних) корреляций, отвечающих поляризац. эффектам в кулоновской системе, используют зависящее от времени ур-ние Хартри — Фока:

$$i\hbar \partial R(q, q', t) / \partial t = (T_q + W_q - T_{q'} - W_{q'}) R(q, q', t)$$

(индекс указывает переменную, на к-рую действует оператор). Это ур-ние определяет нестационарную одночастичную матрицу плотности и оказывается равноценным приближению случайных фаз (приближению высокой плотности), совпадая в то же время с кинетич. ур-нием, включающим С. п. без учёта столкновений. Его применяют для описания коллективных возбуждённых состояний системы.