Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. С. Кузьменков, С. Г. Максимов, В. В. Федосеев, Микроскопическая квантовая гидродинамика систем фермионов. I, *ТМФ*, 2001, том 126, номер 1, 136–148

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf420>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.197.130.99

26 апреля 2023 г., 18:15:28

© 2001 г. Л. С. Кузьменков*, С. Г. Максимов*, В. В. Федосеев*

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ КВАНТОВАЯ ГИДРОДИНАМИКА СИСТЕМ ФЕРМИОНОВ. I

На основании уравнения Шредингера выведены фундаментальные уравнения микроскопической квантовой гидродинамики фермионов во внешнем электромагнитном поле (уравнения баланса частиц, импульса, энергии и магнитного момента). Произведено уточнение вида гамильтониана спин-спинового взаимодействия. Показано, что для многочастичной системы фермионов процедура замыкания системы уравнений баланса требует введения эффективного одночастичного уравнения Шредингера.

Коллективные физические процессы в системах взаимодействующих частиц связаны с перераспределением числа частиц, импульса, энергии, электромагнитного поля в физическом пространстве трех измерений. Явный учет причинно-следственных связей в динамике таких процессов приводит к необходимости перехода от описания системы частиц при помощи волновой функции, заданной в конфигурационном пространстве, к описанию при помощи функций в физическом пространстве. Эта задача для частиц без собственного магнитного момента рассмотрена в работе [1], где показано, что уравнение Шредингера для системы многих частиц может быть представлено в виде, вообще говоря, бесконечной системы уравнений гидродинамического типа. Фундаментальными среди этих уравнений являются уравнения баланса числа частиц, баланса импульса частиц и поля, баланса энергии (уравнения микроскопической квантовой гидродинамики). В отличие от результатов работ [2] (см. с. 269–287) и [3], эти микроскопические уравнения получены лишь на основании квантово-механического определения вероятности. Вместе с тем широкий класс нестационарных задач в атомной физике, физике конденсированного состояния вещества и физике плазмы не может быть рассмотрен без эффектов, обусловленных собственными магнитными моментами частиц, которые дают вклад в уравнения баланса. Поэтому в предлагаемой работе дается вывод фундаментальных уравнений микроскопической квантовой гидродинамики для системы фермионов во внешнем электромагнитном поле, среди которых есть и уравнение баланса для плотности магнитного момента. Эта задача потребовала также уточнения вида гамильтониана спин-спинового взаимодействия. Так как фундаментальные уравнения микроскопической квантовой гидродинамики не образуют замкнутого математического аппарата, рассмотрена общая проблема замыкания уравнений баланса.

---

*Московский государственный университет, Москва, Россия. E-mail: lsk@nabla.phys.msu.ru, serguei@teor242.phys.msu.ru, wladdy@teor242.phys.msu.ru

В части II данной работы вычислены корреляционные функции, обменная энергия спин-спинового взаимодействия на основании непротиворечивого гамильтониана спин-спинового взаимодействия. В качестве приложения метода микроскопической квантовой гидродинамики рассмотрена задача о многоэлектронном атоме, для которой получена замкнутая система уравнений. Эта задача является обобщением известной модели Томаса–Ферми–Дирака на случай нестационарных состояний атома и учитывает обменные спин-спиновые взаимодействия. Для стационарных состояний найден интеграл уравнения баланса импульса, который определяет связь между концентрацией электронов и потенциалом поля.

1. Гамильтониан спин-спинового взаимодействия. Взаимодействие собственных магнитных моментов частиц подобно взаимодействию магнитных диполей. Поэтому гамильтониан спин-спинового взаимодействия обычно принимается в виде [4]–[6]

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum'_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left(\delta^{\alpha\beta} - \frac{3x_{ij}^\alpha x_{ij}^\beta}{r_{ij}^2} \right) M_i^\alpha M_j^\beta = -\frac{1}{2} \sum'_{i,j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^\alpha \partial x_i^\beta} \frac{1}{r_{ij}} M_i^\alpha M_j^\beta, \quad (1)$$

где штрих у знака суммы означает $i \neq j$, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $x_{ij}^\alpha = x_i^\alpha - x_j^\alpha$, $\alpha = 1, 2, 3$, а i, j – номера частиц или ячеек кристалла. Такой гамильтониан приводит к отличной от нуля дивергенции магнитной индукции. При этом, однако, не учитывается тот факт, что дивергенция магнитной индукции равна нулю всюду. Действительно, магнитная индукция системы N магнитных диполей в вакууме равна

$$B^\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} M_j^\beta = \int d\mathbf{r}' \frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \sum_{j=1}^N M_j^\beta \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j), \quad (2)$$

где $\sum_{j=1}^N \mathbf{M}_j \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \equiv \mathbf{M}(\mathbf{r}')$ – микроскопическая плотность магнитного момента. Простое дифференцирование соотношения (2) дает

$$\text{div } \mathbf{B} = \int d\mathbf{r}' \frac{\partial}{\partial x^\beta} \Delta \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} M^\beta(\mathbf{r}') = -4\pi \text{div } \mathbf{M}(\mathbf{r})$$

и приводит, таким образом, к отличным от нуля источникам магнитного поля. В этом случае, как легко видеть, $\text{rot } \mathbf{B} = 0$.

Корректный вид гамильтониана спин-спинового взаимодействия можно получить непосредственно из классических уравнений Максвелла

$$\text{div } \mathbf{B} = 0, \quad \text{rot}(\mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}) = 0, \quad (3)$$

где $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ – плотность собственных магнитных моментов электронов. Из уравнений (3) имеем

$$\Delta B^\alpha = 4\pi \left(\delta^{\alpha\beta} \Delta - \frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \right) M^\beta. \quad (4)$$

Магнитную индукцию можно представить в виде

$$B^\alpha(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M^\beta(\mathbf{r}'). \quad (5)$$

Подставляя (5) в (4), находим уравнение для функции Грина $G^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$:

$$\Delta G^{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = 4\pi \left(\delta^{\alpha\beta} \Delta - \frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \right) \delta(\mathbf{r}). \quad (6)$$

В фурье-представлении $G^{\alpha\beta}$ имеет вид

$$G^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = 4\pi \left(\delta^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{\mathbf{k}^2} \right), \quad (7)$$

поэтому

$$G^{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \frac{1}{r} + 4\pi \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}). \quad (8)$$

На основании принципа суперпозиции искомый гамильтониан равен

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum'_{i,j=1}^N G_{ij}^{\alpha\beta} M_i^\alpha M_j^\beta, \quad G_{ij}^{\alpha\beta} = G^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (9)$$

При переходе к квантово-механическому описанию функцию M_i^α следует заменить оператором $\widehat{M}_i^\alpha = \mu_B \hat{\sigma}_i^\alpha$ магнитного момента i -й частицы.

Для двух фермионов гамильтониан спин-спинового взаимодействия может быть получен из релятивистского выражения для амплитуды рассеяния двух фермионов (см. с. 383–390 в книге [7]):

$$M_{\text{ff}} = e^2 (\bar{u}'_1 \gamma^0 u_1) D^{00}(p'_1 - p_1) (\bar{u}'_2 \gamma^0 u_2) + e^2 (\bar{u}'_1 \gamma^\alpha u_1) D^{\alpha\beta}(p'_1 - p_1) (\bar{u}'_2 \gamma^\beta u_2), \quad (10)$$

$$p_1 + p_2 = p'_1 + p'_2, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3,$$

с последующим разложением ее в ряд до членов $\sim 1/c^2$ (известное уравнение Брейта). Здесь фотонный пропагатор в кулоновской калибровке имеет вид

$$D^{00} = -\frac{4\pi}{\mathbf{q}^2}, \quad D^{0\alpha} = 0, \quad D^{\alpha\beta} = -\frac{4\pi}{\frac{\omega^2}{c^2} - \mathbf{q}^2} \left(\delta^{\alpha\beta} - \frac{q^\alpha q^\beta}{\mathbf{q}^2} \right). \quad (11)$$

Биспинорная амплитуда свободной частицы $u_{\mathbf{p}}$ с требуемой точностью выражается через спинорную амплитуду $w_{\mathbf{p}}$ волновой функции φ :

$$u_{\mathbf{p}} = \sqrt{2mc^2} \begin{pmatrix} (1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2 c^2}) w_{\mathbf{p}} \\ \frac{(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p})}{2mc} w_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}, \quad \varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon V}} w_{\mathbf{p}} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}). \quad (12)$$

С точностью до членов $\sim 1/c^2$ волновая функция φ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}\right)\varphi = (\varepsilon - mc^2)\varphi.$$

Из (10)–(12) получаем

$$\begin{aligned} M_{\text{fi}} &= -4m_1m_2c^4 w_1'^+ w_2'^+ \hat{U}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}) w_1 w_2, \\ \hat{U}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}) &= 4\pi e^2 \left\{ \frac{1}{\mathbf{q}^2} - \frac{1}{8m_1^2c^2} - \frac{1}{8m_2^2c^2} + \frac{(\mathbf{q}\mathbf{p}_1)(\mathbf{q}\mathbf{p}_2)}{m_1m_2c^2\mathbf{q}^4} - \frac{(\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)}{m_1m_2c^2\mathbf{q}^2} + \frac{i\hat{\sigma}_1[\mathbf{q}\mathbf{p}_1]}{4m_1^2c^2\mathbf{q}^2} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{i\hat{\sigma}_1[\mathbf{q}\mathbf{p}_2]}{2m_1m_2c^2\mathbf{q}^2} - \frac{i\hat{\sigma}_2[\mathbf{q}\mathbf{p}_2]}{4m_2^2c^2\mathbf{q}^2} + \frac{i\hat{\sigma}_2[\mathbf{q}\mathbf{p}_1]}{2m_1m_2c^2\mathbf{q}^2} \right\} + \hat{U}_{\text{spin}}(\mathbf{q}), \end{aligned}$$

где интересующий нас потенциал спин-спинового взаимодействия имеет вид

$$\hat{U}_{\text{spin}}(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{4m_1m_2c^2} 4\pi \left(\frac{q^\alpha q^\beta}{\mathbf{q}^2} - \delta^{\alpha\beta} \right) \hat{\sigma}_1^\alpha \hat{\sigma}_2^\beta, \quad (13)$$

а в координатном представлении

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{spin}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \hat{U}_{\text{spin}}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = \\ &= \frac{e^2}{4m_1m_2c^2} \hat{\sigma}_1^\alpha \hat{\sigma}_2^\beta \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \frac{1}{(2\pi)^3} \int 4\pi \frac{d\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) - 4\pi \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}) \right) = \\ &= \frac{e^2}{4m_1m_2c^2} \hat{\sigma}_1^\alpha \hat{\sigma}_2^\beta \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \frac{1}{r} - 4\pi \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}) \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Этот результат находится в согласии с найденным выше выражением для функции Грина (8). Следующим шагом в получении гамильтониана спин-спинового взаимодействия является выделение δ -функции, присутствующей неявно в выражении $-\partial^2(1/r)/\partial x^\alpha \partial x^\beta$, путем усреднения по всем направлениям вектора $\mathbf{r}$ (см. [7]):

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^\alpha \partial x^\beta} \frac{1}{r} = \frac{\delta^{\alpha\beta}}{r^3} - \frac{3x^\alpha x^\beta}{r^5} + \frac{4\pi}{3} \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}). \quad (15)$$

Действительно, взяв след от обеих частей равенства (15), получаем тождество. В результате спин-спиновая часть потенциала Брейта приобретает вид

$$\hat{U}_{\text{spin}}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4m_1m_2c^2} \hat{\sigma}_1^\alpha \hat{\sigma}_2^\beta \left(\frac{\delta^{\alpha\beta}}{r^3} - \frac{3x^\alpha x^\beta}{r^5} - \frac{8\pi}{3} \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}) \right). \quad (16)$$

В теории ядерного магнитного резонанса вводится так называемое контактное взаимодействие Ферми $(-8\pi\mu_B^2 \hat{\sigma}^2 \delta(\mathbf{r})/3)$ для устранения неопределенности типа $0 \times \infty$, возникающей при вычислении квантово-механического среднего от гамильтониана спин-спинового взаимодействия в форме (1) (см. с. 95–102 в книге [8]).

Однако, как и выражение (1), формула (16) приводит к отличной от нуля дивергенции магнитной индукции. Причина такого противоречия лежит в некорректном выделении δ -функции в формуле (15). Несмотря на то что след от равенства (15) приводит к тождеству, дифференцирование левой части (15) по x^β дает

$$-\frac{\partial}{\partial x^\alpha} \Delta \frac{1}{r} = 4\pi \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \delta(\mathbf{r}),$$

а для правой части (15) получаем

$$\frac{4\pi}{3} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \delta(\mathbf{r}).$$

По-видимому, в этом случае необходимы более тонкие методы анализа обобщенных функций (см. с. 320 в книге [9]). Здесь для нас важным является тот факт, что гамильтониан спин-спинового взаимодействия, свободный от указанных противоречий, должен быть принят в виде

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N G_{ij}^{\alpha\beta} M_i^\alpha M_j^\beta, \quad G_{ij}^{\alpha\beta} = G^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (17)$$

Этот гамильтониан лежит в основе выводов, изложенных ниже.

2. Исходные уравнения. Рассмотрим находящуюся во внешнем электромагнитном поле систему N взаимодействующих фермионов с одинаковыми массами, зарядами и собственными магнитными моментами. Состояние системы N фермионов задается волновой функцией в $3N$ -мерном конфигурационном пространстве, являющейся спинором N -го ранга:

$$\psi_S(R, t) = \psi_{s_1 \dots s_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t).$$

Динамика такой системы описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi_S(R, t)}{\partial t} = (\hat{H}\psi)_S(R, t). \quad (18)$$

Гамильтониан системы является матричной недиагональной формой по дискретным спинным индексам, так что действие его на волновую функцию будет иметь вид

$$(\hat{H}\psi)_S(R, t) = \sum_{S'} \hat{H}_{SS'} \psi_{S'}(R, t) = \sum_{s'_1, \dots, s'_N} \hat{H}_{s_1 \dots s_N s'_1 \dots s'_N} \psi_{s'_1 \dots s'_N}(R, t).$$

Гамильтониан рассматриваемой системы равен

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\hat{\mathbf{D}}_i^2}{2m} + e\varphi(\mathbf{r}_i, t) - \mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_i \mathbf{B}(\mathbf{r}_i, t)) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (e^2 G_{ij} - \mu_B^2 G_{ij}^{\alpha\beta} \hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\beta), \quad (19)$$

где $\hat{D}_i^\alpha = -i\hbar \nabla_i^\alpha - eA_i^\alpha/c$, $\mu_B = e\hbar/2mc$ – магнетон Бора, $A_i^\alpha \equiv A^\alpha(\mathbf{r}_i, t)$ – векторный потенциал поля $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$, $G_{ij} = 1/|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ – функция Грина оператора Лапласа, а $G_{ij}^{\alpha\beta}$

определена формулами (8), (9). Для матриц Паули $\hat{\sigma}_i^\alpha$ справедливы коммутационные соотношения

$$[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta] = 2i\delta_{ij}\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}_i^\gamma, \quad (20)$$

где суммирование производится только по повторяющимся греческим индексам. Оператор $\hat{\sigma}_i^\alpha$ действует лишь на соответствующую спиновую координату спинора $\psi_S(R, t)$, т.е. его матричные элементы имеют вид

$$(\hat{\sigma}_i^\alpha)_{SS'} \equiv \langle S | \hat{\sigma}_i^\alpha | S' \rangle = \hat{\sigma}_{s_i s'_i}^\alpha \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta(s_j - s'_j), \quad (21)$$

где $\hat{\sigma}_{s_i s'_i}^\alpha$ — обычные матрицы Паули в пространстве $SU(2)$. Для перехода из конфигурационного пространства в физическое следует определить операторы материальных полей. Достаточно задать оператор плотности числа частиц (или концентрации) [1]. Тогда операторы плотностей потоков появляются автоматически в уравнениях непрерывности и баланса импульса.

Усредненная по квантово-механическим состояниям концентрация частиц есть величина

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &= \sum_S \int dR \psi_S^*(R, t) \hat{n}(\mathbf{r}, R) \psi_S(R, t) = \\ &= \sum_S \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \psi_S^*(R, t) \psi_S(R, t), \end{aligned} \quad (22)$$

где $dR = \prod_{k=1}^N d\mathbf{r}_k$, $S = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$.

3. Фундаментальные уравнения квантовой гидродинамики фермионов.

Вывод уравнений квантовой гидродинамики со спином аналогичен приведенному в работе [1] с той лишь особенностью, что в данном случае следует воспользоваться коммутационными соотношениями (20). В результате уравнение непрерывности и уравнение баланса импульса приобретают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla^\alpha j^\alpha(\mathbf{r}, t) &= 0, \quad (23) \\ \frac{\partial j^\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla^\beta \Pi^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) &= en(\mathbf{r}, t) E_{\text{ext}}^\alpha(\mathbf{r}, t) - \\ &- \int d\mathbf{r}' e^2 \nabla^\alpha G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \frac{1}{m} \frac{e}{c} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} j^\beta(\mathbf{r}, t) B_{\text{ext}}^\gamma(\mathbf{r}, t) + \\ &+ M^\beta(\mathbf{r}, t) \nabla^\alpha B_{\text{ext}}^\beta(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' \nabla^\alpha G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M^{\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (24)$$

где определения плотности импульса частиц

$$j^\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_S \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{2} \{ \psi_S^* (D_i^\alpha \psi_S) + (D_i^\alpha \psi_S)^* \psi_S \} \quad (25)$$

и тензора плотности потока импульса

$$\begin{aligned} \Pi^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \sum_S \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{4m} \times \\ \times \{ (D_i^\beta \psi_S)^* (D_i^\alpha \psi_S) + \psi_S^* (D_i^\beta D_i^\alpha \psi_S) + \text{э.с.} \} \end{aligned} \quad (26)$$

появляются автоматически из уравнения Шредингера (через “э.с.” обозначена эрмитово сопряженная часть). Уравнение баланса импульса (24) содержит плотность магнитного момента частиц $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$:

$$M^\beta(\mathbf{r}, t) = \sum_S \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mu_B \psi_S^* (\hat{\sigma}_i^\beta \psi)_S. \quad (27)$$

Кулоновские и спин-спиновые взаимодействия между частицами представлены в (24) слагаемыми, в которых

$$n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_S \int dR \sum_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \psi_S^* \psi_S \quad (28)$$

— двухчастичная плотность вероятности (нормированная на $N(N-1)$) нахождения двух частиц в окрестностях точек $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, а

$$\begin{aligned} M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_S \int dR \sum_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \mu_B^2 \psi_S^* (\hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\beta \psi)_S = \\ = \sum_{s_1, \dots, s_N} \int dR \sum_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \mu_B^2 \times \\ \times \psi_{s_1 \dots s_N}^*(R, t) \sum_{s'_i, s'_j} \sigma_{s_i s'_i}^\alpha \sigma_{s_j s'_j}^\beta \psi_{s_1 \dots s_{i-1} s'_i s_{i+1} \dots s_{j-1} s'_j s_{j+1} \dots s_N}(R, t) \end{aligned} \quad (29)$$

— соответствующий (27) двухчастичный тензор плотности магнитного момента.

Очевидно, что для гидродинамического описания систем со спином недостаточно уравнений баланса числа частиц и импульса. Для полного описания таких систем необходимо также уравнение динамики плотности магнитного момента $M^\alpha(\mathbf{r}, t)$. Это уравнение нетрудно получить путем дифференцирования выражения (27) по времени с использованием уравнения Шредингера (18) и коммутационных соотношений (20). В результате приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial M^\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla^\beta J_M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \\ = \frac{e}{mc} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \left\{ M^\beta(\mathbf{r}, t) B_{\text{ext}}^\gamma(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' G^{\gamma\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M^{\beta\delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \right\}, \end{aligned} \quad (30)$$

где

$$J_M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \sum_S \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{\mu_B}{2m} \{ \psi_S^* (\hat{\sigma}_i^\alpha D_i^\beta \psi_S) + (\hat{\sigma}_i^\alpha D_i^\beta \psi_S)^* \psi_S \} \quad (31)$$

– тензор плотности потока магнитного момента.

Уравнение (30) является обобщением известного уравнения Блоха (см., например, [10]) на случай пространственно распределенной системы частиц.

4. Поле скоростей. Для выделения потоковых скоростей в уравнениях квантовой гидродинамики необходимо представить волновую функцию в виде

$$\psi_S(R, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \sum_{i=1}^N m \mathbf{r}_i\right) \varphi_S(\mathbf{r}, R, t), \quad (32)$$

где гидродинамическая скорость $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ определяется из условия

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = mn(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t),$$

при этом для нового спинора $\varphi_S(\mathbf{r}, R, t)$ получаем

$$\sum_S \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{2} \{ \varphi_S^* (D_i^\alpha \varphi_S) + (D_i^\alpha \varphi_S)^* \varphi_S \} = 0,$$

$\varphi_S(\mathbf{r}, R, t)$ – волновая функция, определенная относительно локальной системы координат с началом в точке $\mathbf{r}$ и мгновенной скоростью $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$.

Действуя производной $\mathbf{D}_i$ на волновую функцию $\psi(R, t)$, получаем

$$D_i^\alpha \psi(R, t) = mv^\alpha(\mathbf{r}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{v} \sum_{i=1}^N m \mathbf{r}_i\right) \varphi(\mathbf{r}, R, t) + \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{v} \sum_{i=1}^N m \mathbf{r}_i\right) D_i^\alpha \varphi(\mathbf{r}, R, t).$$

В результате уравнения (23), (24) и (30) приобретают вид

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla(n(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)) = 0, \quad (33)$$

$$\begin{aligned} mn(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \nabla \right) v^\alpha(\mathbf{r}, t) + \nabla^\beta p^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) &= en(\mathbf{r}, t) E_{\text{ext}}^\alpha(\mathbf{r}, t) - \\ &- \int d\mathbf{r}' e^2 \nabla^\alpha G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \frac{e}{c} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} n(\mathbf{r}, t) v^\beta(\mathbf{r}, t) B_{\text{ext}}^\gamma(\mathbf{r}, t) + \\ &+ M^\beta(\mathbf{r}, t) \nabla^\alpha B_{\text{ext}}^\beta(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' \nabla^\alpha G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M^{\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial M^{\alpha}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla^\beta (v^\beta(\mathbf{r}, t) M^\alpha(\mathbf{r}, t) + j_M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)) &= \\ = \frac{e}{mc} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \left\{ M^\beta(\mathbf{r}, t) B_{\text{ext}}^\gamma(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' G^{\gamma\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M^{\beta\delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \right\}, \end{aligned} \quad (35)$$

где тензоры $p^{\alpha\beta}$ и $j_M^{\alpha\beta}$ отличаются от соответствующих им $\Pi^{\alpha\beta}$ и $J_M^{\alpha\beta}$ лишь заменой спинора ψ в (26) и (31) на “локальный” спинор φ .

5. Уравнение баланса энергии. Следуя методу построения оператора плотности энергии в квантовой механике многих частиц, изложенному в работе [1], легко получить следующее выражение для плотности энергии (без учета внешних полей):

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{r}, t) = & \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{2} \left\{ \psi^+ \frac{1}{2m} (D_i^2 \psi) + \frac{1}{2m} (D_i^2 \psi)^+ \psi \right\} + \\ & + \int dR \sum'_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{2} \psi^+ (e^2 G_{ij} - \mu_B^2 G_{ij}^{\alpha\beta} \hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\beta) \psi. \end{aligned} \quad (36)$$

После выделения гидродинамической скорости плотность энергии $\varepsilon(\mathbf{r}, t)$ можно представить в виде суммы конвективной части и плотности внутренней энергии $n(\mathbf{r}, t)\epsilon(\mathbf{r}, t)$:

$$\varepsilon(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) \frac{mv^2(\mathbf{r}, t)}{2} + n(\mathbf{r}, t)\epsilon(\mathbf{r}, t),$$

$\epsilon(\mathbf{r}, t)$ – удельная энергия частиц. Она определяется выражением

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t)\epsilon(\mathbf{r}, t) = & \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{2} \left\{ \varphi^+ \frac{1}{2m} (D_i^2 \varphi) + \frac{1}{2m} (D_i^2 \varphi)^+ \varphi \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \int dR \sum'_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \varphi^+ (e^2 G_{ij} - \mu_B^2 G_{ij}^{\alpha\beta} \hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\beta) \varphi. \end{aligned}$$

Дифференцируя соотношение (36) по времени, используя уравнение Шредингера и исключая конвективные слагаемые, получаем следующее уравнение баланса внутренней энергии:

$$n \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \right) \epsilon + p^{\alpha\beta} \nabla^\alpha v^\beta + \nabla \mathbf{q} = - \left(\nabla^\alpha B_{\text{ext}}^\beta \right) j_M^{\alpha\beta} - \mathfrak{W}, \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = & \int dR \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{8m^2} \{ \varphi^+ (\mathbf{D}_i D_i^2 \varphi) + (\mathbf{D}_i \varphi)^+ (\mathbf{D}_i^2 \varphi) + \text{к.с.} \} + \\ & + \frac{1}{2} \int dR \sum'_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \frac{1}{2m} \{ \varphi^+ (e^2 G_{ij} - \mu_B^2 G_{ij}^{\alpha\beta} \hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\beta) (\mathbf{D}_i \varphi) + \text{к.с.} \} \end{aligned}$$

– плотность теплового потока внутренней энергии.

Плотность работы $\mathfrak{W}(\mathbf{r}, t)$, совершаемой системой со спинами на тепловых скоростях (относительно локальной системы координат, связанной с гидродинамическим потоком) во внешнем магнитном поле, имеет вид

$$\begin{aligned} \mathfrak{W}(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' (v^\beta(\mathbf{r}', t) - v^\beta(\mathbf{r}, t)) \times \\ & \times \{ n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) e^2 \nabla^\beta G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - M^{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \nabla^\beta G^{\alpha\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' \left(\mathfrak{M}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \mathfrak{M}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) \right) \nabla^\beta G^{\alpha\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \\
& - \frac{e}{mc} B_{\text{ext}}^\alpha(\mathbf{r}, t) \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \int d\mathbf{r}' M^{\beta\delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) G^{\gamma\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (38)
\end{aligned}$$

где тензор 3-го ранга $\mathfrak{M}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ имеет смысл двухчастичной плотности потока магнитного момента относительно локальной системы координат (на тепловых скоростях):

$$\mathfrak{M}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \int dR \sum_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \frac{\mu_B^2}{2m} \{ \varphi^\dagger \hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\gamma (D_i^\beta \varphi) + (D_i^\beta \varphi)^\dagger \hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\gamma \varphi \}.$$

Заметим, что тензор $\mathfrak{M}^{\alpha\gamma\beta}$ является симметричным по первым двум индексам, так как входящие в его определение матрицы Паули относятся к разным частицам и, следовательно, коммутируют.

Интегро-дифференциальное уравнение (37) представляет собой исходное уравнение неравновесной квантовой термодинамики системы заряженных частиц со спином.

Полученная выше система уравнений квантовой гидродинамики (33), (34), (37) и (38) является точной в том смысле, что при ее выводе не привлекались какие-либо дополнительные для квантовой механики предположения. Однако эти уравнения являются незамкнутыми, так как содержат в слагаемых с взаимодействием двухчастичные функции $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, $M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ и $\mathfrak{M}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, которые, в свою очередь, не выражаются через одночастичные. Для их определения можно получить соответствующие уравнения, которые, как естественно ожидать, будут содержать трехчастичные функции. Продолжая эту процедуру, мы приходим к цепочке уравнений для физических полей различной тензорной размерности, являющейся гидродинамическим аналогом цепочки Боголюбова. Такая цепочка уравнений полностью эквивалентна уравнению Шредингера. Кроме того, приведенные выше уравнения, как и уравнения классической гидродинамики, должны быть дополнены уравнениями состояния, конкретизирующими как состояние системы частиц, так и характер физических процессов в такой системе.

Для решения конкретных физических задач необходимо оборвать эту цепочку, тем самым произведя процедуру замыкания системы уравнений.

6. Проблема замыкания уравнений баланса и одночастичное уравнение Шредингера. Двухчастичные гидродинамические функции являются функционалами волновой функции $\varphi(\mathbf{r}, R, t)$. Процедура получения замкнутого аппарата означает нахождение функциональной зависимости двухчастичных функций от одночастичных полевых функций $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ и $\epsilon(\mathbf{r}, t)$.

Для установления такой зависимости выделим в волновой функции в каждый момент времени антисимметризованное произведение одночастичных ортогональных спиноров $\varphi_{f_i}(x_i, t)$:

$$\varphi(\mathbf{r}, x_1, \dots, x_N, t) = \langle x_1, \dots, x_N | n_1, n_2, \dots; t \rangle + \zeta(\mathbf{r}, x_1, \dots, x_N, t), \quad (39)$$

где

$$\langle x_1, \dots, x_N | n_1, n_2, \dots; t \rangle = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P P(\varphi_{f_1}(x_1, t) \dots \varphi_{f_N}(x_N, t)).$$

Через x_i мы для краткости обозначили совокупность пространственных координат $\mathbf{r}_i$ и спинорного индекса s_i . Поскольку одночастичные спиноры $\varphi_{f_i}(x_i, t)$ не зависят от координат в физическом пространстве $\mathbf{r}$, то зависимость от $\mathbf{r}$ “локальной” волновой функции $\varphi(\mathbf{r}, R, t)$ может реализовываться через числа заполнения n_f , т.е. числа заполнения являются функциями $\mathbf{r}$ и в общем случае t .

Потребуем, чтобы одночастичные волновые функции $\varphi_{f_i}(x_i, t)$ хорошо аппроксимировали гидродинамические функции, такие как концентрация, ток, плотность магнитного момента и т.д. Что касается возникающих при этом дополнительных условий на функцию ζ , то здесь ситуация сходна с методом Чепмена–Энскога, в котором плотность числа частиц, поле скоростей и плотность кинетической энергии определяются интегрированием только локально-равновесной части функции распределения. Соответствующие интегралы от неравновесной составляющей предполагаются равными нулю. Аналогичные предположения содержит также метод Крылова–Боголюбова: высшие гармоники не дают вклада в полную амплитуду нелинейных колебаний.

Эволюция одночастичного спинора $\varphi_{f_i}(x_i, t)$ описывается одночастичным уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_f(x, t)}{\partial t} = (\hat{h}\varphi_f)(x, t) \quad (40)$$

с эффективным одночастичным гамильтонианом $\hat{h}$. Потребуем, чтобы одночастичный гамильтониан $\hat{h}$ был согласованным с уравнениями (33)–(35), (37), (38) и уравнениями поля. При этом основными для нас уравнениями, определяющими динамику системы, являются уравнения гидродинамики. Уравнение (40) носит вспомогательный характер. Поэтому нет необходимости требовать, чтобы одночастичный гамильтониан $\hat{h}$ содержал квантовые корреляции и уравнение (40) было полностью эквивалентно уравнениям квантовой гидродинамики.

Подстановка (39) в двухчастичные функции (28), (29) дает следующее групповое разложение:

$$\begin{aligned} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= n(\mathbf{r}, t)n(\mathbf{r}', t) + g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \tilde{g}[\zeta], \\ M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= M^\alpha(\mathbf{r}, t)M^\beta(\mathbf{r}', t) + \mathbf{m}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \tilde{\mathbf{m}}^{\alpha\beta}[\zeta], \\ \mathfrak{M}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \frac{1}{2} \{ j_M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)M^\gamma(\mathbf{r}', t) + j_M^{\gamma\beta}(\mathbf{r}, t)M^\alpha(\mathbf{r}', t) \} + \\ &\quad + \mathfrak{h}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \tilde{\mathfrak{h}}^{\alpha\gamma\beta}[\zeta], \end{aligned} \quad (41)$$

где $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, $\mathbf{m}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ и $\mathfrak{h}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ определяют обменные корреляции, а $\tilde{g}[\zeta]$, $\tilde{\mathfrak{h}}^{\alpha\gamma\beta}[\zeta]$ и $\tilde{\mathbf{m}}^{\alpha\beta}[\zeta]$ – слагаемые, содержащие функцию $\zeta(x_1, \dots, x_N, t)$. Подстановка (41) в уравнения (33)–(35), (37) и (38) приводит к появлению самосогласованных электрического $\mathbf{E}_{\text{int}}$ и магнитного $\mathbf{B}_{\text{spin}}$ полей, удовлетворяющих следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E}_{\text{int}} &= 4\pi en, & \operatorname{div} \mathbf{B}_{\text{spin}} &= 0, \\ \operatorname{rot}(\mathbf{B}_{\text{spin}} - 4\pi \mathbf{M}) &= 0, & \operatorname{rot} \mathbf{E}_{\text{int}} &= 0. \end{aligned}$$

Уравнения (34), (35) не содержат магнитного поля, вызванного диамагнитными токами. Кроме того, в выражении для силы Лоренца отсутствует взаимодействие тока с полем $\mathbf{B}_{\text{spin}}$. Эти обстоятельства связаны с недостатком исходного нерелятивистского гамильтониана, взятого за основу для получения гидродинамических уравнений. Указанный недостаток может быть устранен, в частности, путем сравнения уравнений классической и квантовой гидродинамики. Классические уравнения для частиц с электромагнитным взаимодействием содержат аддитивно внешнее магнитное поле и поле, обусловленное токами. Соответствующие квантовые уравнения в пределе должны совпадать с классическими и, следовательно, содержать информацию о всей совокупности гидродинамических эффектов классической физики. Это возможно, если в уравнениях квантовой гидродинамики присутствует полная сила Лоренца и учтено взаимодействие магнитного момента с полным магнитным полем. Таким образом, учитывая требования принципа соответствия непосредственно в уравнениях баланса, мы оставляем без внимания проблему конструирования нового гамильтониана на основании того же принципа и приходим к уравнениям

$$\begin{aligned} mn(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \nabla \right) v^\alpha(\mathbf{r}, t) + \nabla^\beta p^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \\ = en(\mathbf{r}, t) \left(E^\alpha(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} v^\beta(\mathbf{r}, t) B^\gamma(\mathbf{r}, t) \right) + \\ + M^\beta(\mathbf{r}, t) \nabla^\alpha B^\beta(\mathbf{r}, t) - \int d\mathbf{r}' e^2 \nabla^\alpha G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \\ + \int d\mathbf{r}' \nabla^\alpha G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') m^{\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + f^\alpha[\zeta], \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial M^\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla^\beta (v^\beta(\mathbf{r}, t) M^\alpha(\mathbf{r}, t) + j_M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)) = \\ = \frac{e}{mc} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} M^\beta(\mathbf{r}, t) B^\gamma(\mathbf{r}, t) + \\ + \frac{e}{mc} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \int d\mathbf{r}' G^{\gamma\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') m^{\beta\delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + f_M^\alpha[\zeta], \end{aligned} \quad (43)$$

где $f^\alpha[\zeta]$ и $f_M^\alpha[\zeta]$ — слагаемые, содержащие функцию $\zeta(x_1, \dots, x_N, t)$, а поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяют полным уравнениям Максвелла:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi en, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \\ \operatorname{rot}(\mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}) = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} en\mathbf{v}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (44)$$

В качестве одночастичного гамильтониана естественно взять гамильтониан с самосогласованным полем:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_f}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \varphi_f - \mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)) \varphi_f + e\Phi(\mathbf{r}, t) \varphi_f. \quad (45)$$

Скалярный $\Phi(\mathbf{r}, t)$ и векторный $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ потенциалы электромагнитного поля являются решениями одновременно уравнений Максвелла (44) с источниками $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$

и $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ и уравнений квантовой гидродинамики (42) и (43) с обменными корреляционными функциями $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, $m^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ и $h^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, функционально связанными с одночастичными волновыми функциями $\varphi_f(\mathbf{r}, s, t)$. Таким образом, задача становится замкнутой и самосогласованной не только относительно полей $\Phi(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, но и относительно одночастичных спиноров $\varphi_f(\mathbf{r}, t)$. Заметим, что рассмотрение процессов при конечных температурах приводит к необходимости включения в рассматриваемую систему уравнений также уравнения баланса энергии (37) и (38).

Общая схема получения замкнутого аппарата квантовой гидродинамики после расчета корреляционных функций реализована в части II настоящей работы для нестационарной задачи о многоэлектронном атоме.

Список литературы

- [1] Л. С. Кузьменков, С. Г. Максимов. ТМФ. 1999. Т. 118. С. 287–304.
- [2] К. П. Гуров. Основания кинетической теории. М.: Наука, 1966.
- [3] Н. Н. Боголюбов. Избранные труды. Т. 3. Киев: Наукова думка, 1971.
- [4] А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяттар, С. В. Пелетминский. Спиновые волны. М.: Наука, 1967.
- [5] О. Бор, Б. Моттelson. Структура атомного ядра. Т. 1. М.: Мир, 1971.
- [6] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin. Solid State Physics. New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [7] В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989.
- [8] И. В. Александров. Теория ядерного магнитного резонанса. М.: Наука, 1964.
- [9] В. С. Владимиров. Обобщенные функции в математической физике. М.: Наука, 1979.
- [10] R. K. Wangness. Phys. Rev. 1955. V. 98. № 4. P. 927.

Поступила в редакцию 22.VI.2000 г.