

НОВЫЙ ПОДХОД К МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФЕРМИ-СИСТЕМ

В. А. Ходель

Институт атомной энергии им. И. В. Курчатова, Москва

В. Р. Шагинян

Ленинградский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, Гатчина

Предложена новая версия микроскопической теории ферми-систем. Получено замкнутое функциональное уравнение для эффективного потенциала R взаимодействия квазичастиц. Обсуждаются методы вычисления R через потенциал взаимодействия частиц. Показано, что в хорошо известном локальном приближении функциональное уравнение для R сводится к интегродифференциальному. Это приближение с точностью до нескольких процентов воспроизводит монте-карловские уравнения состояния тех модельных систем, для которых монте-карловские результаты известны. Анализируется вклад Δ резонансных степеней свободы в энергию основного состояния. Обсуждаются проблемы микроскопического расчета характеристик фазовых переходов.

A new version of the normal Fermi system microscopic theory is suggested. A functional equation for the effective potential R of the quasiparticle interaction is obtained. Methods for the evaluation of R in terms of the particle potential are discussed. It is shown that in the well known local approximation the functional equation for R is reduced to an integro-differential one. For a number of model examples for which the Monte-Carlo results for the equation of state is known the local approximation proves to reproduce the Monte-Carlo results to an accuracy of a few percent. The contribution of Δ -isobar in the ground state energy is analysed. The problem of the microscopic evaluation of the characteristics of different phase transition is discussed.

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена изложению нового варианта микроскопической теории ферми-систем с произвольным взаимодействием между частицами. Задача любой микроскопической теории — описание свойств рассматриваемой системы через параметры, определяющие ее гамильтониан. К настоящему времени в теории многих тел разработано несколько подходов, связанных с суммированием бесконечных рядов теории возмущений. Один из них — кластерное разложение [1] — предназначен для нахождения парной корреляционной функции $g(r_{12})$, определяющей энергию взаимодействия системы. Разработка алгоритма суммирования диаграмм кластерного разложения для $g(r_{12})$ и методов приближенного решения получающихся уравнений составляет основное содержание FHNC (Fermi hypernetted chain theory) [2]. Этот подход широко и с успехом применяется к опи-

санию свойств различных систем. Но все же часть диаграмм, например, в ядерных расчетах, начиная с пятого порядка, как и во всяком подходе, основанном на использовании теории возмущений, придется отбрасывать, что делает подход уязвимым, особенно тогда, когда он применяется к описанию плотных систем.

Другой вариант микроскопической теории многих тел — *coupled cluster (exp S) theory* — предложен в работах [3—5]. Он оперирует с волновой функцией системы. Точное решение задачи связано в этом подходе с рассмотрением бесконечных систем зацепляющихся уравнений, определяющих вклад многочастичных корреляций. Стандартный метод решения этой системы состоит в обрезании цепочки кластерных уравнений, в результате чего вклад всех кластеров, начиная с некоторого номера k , отбрасывается. Это приводит к погрешностям, оценить которые подчас бывает трудно.

От недостатков, связанных с потерей вклада каких-то графиков теории возмущений, свободен монте-карловский подход [6]. В нем вариационная задача нахождения минимума энергии многочастичной системы, заключающаяся в вычислении многомерных интегралов, решается монте-карловскими методами. Этот метод расчета, будучи весьма трудоемким, особенно для ферми-систем считается наиболее точным методом вычисления энергии основного состояния. Монте-карловские результаты для модельных гамильтонианов рассматриваются как экспериментальные данные и с ними обычно сравнивают результаты, полученные иными методами. К сожалению, метод Монте-Карло лучше всего работает с простыми потенциалами: монте-карловских результатов с реалистическими потенциалами пока нет. Кроме того, в этом подходе вычисляется узкий круг характеристик системы, имеются большие трудности в вычислении спектра одночастичных и коллективных возбуждений системы, параметров низкотемпературного разложения термодинамического потенциала.

Иной подход в течение 20 лет развивается в теории электронного газа, где для расчета парной корреляционной функции используется квазичастичный формализм, развитый Хоэнбергом, Коном и Шемом [7, 8]. Достоинства этого подхода, во-первых, в его простоте и наглядности. Во-вторых, этот подход позволяет использовать достижения теории ферми-жидкости Ландау [9, 10], а если речь идет о неоднородных системах — опыт теории конечных ферми-систем [11].

В русле этих подходов лежит и предлагаемый новый вариант микроскопической теории ферми-систем. Основной инструмент нового подхода — функция линейного отклика системы $\chi(1,2)$ и ее функциональные производные $\frac{\delta\chi}{\delta\rho}$, $\frac{\delta^2\chi}{\delta\rho\delta\rho}$ и т. д. (ρ — плотность системы).

Главное уравнение подхода — функциональное уравнение для эффективного потенциала взаимодействия частиц R , определяющего отличие функции отклика χ -системы от χ_0 -функции отклика невзаимодействующих частиц. Это уравнение формально эквивалентно системе уравнений кластерного подхода или системе уравнений метода гри-

новских функций, но замкнутый вид полученного уравнения и простота интерпретации позволяют разработать относительно простые приближенные методы его решения. В результате в нулевом — локальном — приближении все сводится к одному интегродифференциальному уравнению, которое решается численными методами. Уже это нулевое приближение воспроизводит известные монте-карловские результаты для энергии основного состояния с погрешностью 2—5 % во всем интервале изменения плотности [12, 13]. Тем не менее для некоторых систем точность нулевого приближения может оказаться недостаточной. Значительная часть статьи поэтому посвящена уточнению этого приближения и формулировке итерационных процедур расчета, основанных на использовании локального приближения для функциональных производных χ . Подчеркнем, что ни в нулевом, ни в следующих приближениях никакие совокупности диаграмм теории возмущений не отбрасываются. Более того, на каждом этапе расчетов выполняется одно из основных условий согласования — правило сумм для сжимаемости [14].

Один из разделов работы посвящен микроскопическому расчету констант теории ферми-жидкости Ландау в рамках предлагаемого подхода. Такие расчеты пока не под силу монте-карловским методам. В нашем же подходе для вычисления эффективной массы M^* , констант f , g , характеризующих амплитуду рассеяния квазичастиц у поверхности Ферми, необходимо решать линейные интегральные уравнения с известным ядром, выраженным через эффективный потенциал R ; рассчитываемый отдельно — при нахождении уравнения состояния системы. Мы рассмотрим в обзоре и проблему количественного определения характеристик различных фазовых переходов, происходящих в системе при изменении ее плотности.

1. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Метод, который мы хотим изложить, основан на использовании функции отклика. В этом смысле он — «родственник» подходов, разработанных для вычисления энергии электронного газа в теории твердого тела [8, 14]. Но в отличие от остальных этот позволяет добраться до цели — строгого функционального уравнения для эффективного потенциала взаимодействия частиц R , определяющего и функцию отклика, и многие другие характеристики системы, максимально коротким путем — буквально в несколько шагов.

Мы начнем с уравнения состояния $\varepsilon(\rho)$ нормальной ферми-системы, частицы которой взаимодействуют с помощью скалярного парного потенциала \mathcal{V} . Тогда ее энергия E_0 выражается через функцию линейного отклика плотность — плотность χ следующей формулой [14] (подробности в приложении А): $E_0 = \tau + W$:

$$W = W_H - \frac{1}{2} \int_C \int_C \mathcal{V}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) [\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + 2\pi\rho(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(i\omega)] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{dg_1}{g_1}. \quad (1)$$

Энергия Хартри W_H дается известным соотношением

$$W_H = \frac{1}{2} \iint \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) \mathcal{V}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2)$$

τ — энергия системы невзаимодействующих частиц. Интеграл по константе связи g_1 идет от нуля до реального значения g , интеграл по ω — вдоль мнимой оси от $-i\infty$ до $+i\infty$.

Сразу отметим (подробнее см. разд. 4), что формула, подобная (1), получается и для ядерных гамма-квантов однобозонного обмена. Только теперь в ответ входят и иные функции отклика: χ_s — спин-спиновая и пр.

Напомним, что функция χ линейного отклика плотность — плотность определяет изменение плотности $\delta\rho$ основного состояния системы в слабом скалярном внешнем поле δV_0 :

$$\delta\rho(\mathbf{r}_1, \omega) = \int \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \delta V_0(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2. \quad (3)$$

В полях с мнимой частотой $\omega = i\nu$ передача энергии отсутствует и основное состояние системы так и остается основным. При этом изменение внутренней энергии системы $\delta^2 E_0 = (\tilde{0} | H | \tilde{0}) - (0 | H | 0)$ снова выражается через функцию отклика χ :

$$\delta^2 E_0 = -\frac{1}{2} \iint \delta V_0(\mathbf{r}, \omega) \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \delta V_0^*(\mathbf{r}_2, \omega) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (4)$$

(подробнее см. приложение А).

Из формулы (4) внешнее поле δV_0 с помощью (3) может быть изгнано. Для простоты ограничимся пока однородным случаем. После перехода к фурье-компонентам связь $\delta\rho$ с δV_0 становится алгебраической:

$$\delta\rho(\mathbf{k}\omega) = \chi(\mathbf{k}, \omega) \delta V_0(\mathbf{k}, \omega).$$

Тогда из (3) и (4) следует

$$\delta^2 E_0 = -(1/2) \delta\rho(\mathbf{k}\omega) \chi^{-1}(\mathbf{k}, \omega) \delta\rho(-\mathbf{k}, -\omega)$$

или

$$\frac{\delta^2 E_0}{\delta\rho(\mathbf{k}, \omega) \delta\rho(-\mathbf{k}, -\omega)} = -\chi^{-1}(\mathbf{k}, \omega). \quad (5)$$

Отметим, что (см. [15]):

$$\frac{\delta^2 \tau}{\delta\rho(\mathbf{k}, \omega) \delta\rho(-\mathbf{k}, -\omega)} = -\chi_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega), \quad (6)$$

где $\chi_0(\mathbf{k}, \omega)$ — функция отклика системы невзаимодействующих частиц, движущихся во внешнем самосогласованном поле $U = \delta W/\delta\rho$. Эта функция вычисляется просто [14]:

$$\chi_0(\mathbf{k}, \omega) = \text{Sp} \int G_0(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \varepsilon + \omega/2) G_0(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2, \varepsilon - \omega/2) \frac{d^4 p}{(2\pi)^4 i}, \quad (7)$$

где $G_0(\mathbf{p}, \varepsilon) = (\varepsilon - U - p^2/2M)$ — гриновская функция свободной частицы, M — ее масса. Если ввести обозначения $\omega = i\nu$; $z =$

$= \omega M / k p_F$; $y = k / 2 p_F$, то интеграл (7) запишется в виде

$$\chi_0(z, y) = -\frac{p_F M}{2\pi^2} \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1+z^2}{y} - y \right) \times \right. \\ \left. \times \ln \frac{(1+y)^2 + z^2}{(1-y)^2 + z^2} - z \operatorname{arctg} (2z / (z^2 + y^2 - 1)) \right]. \quad (8)$$

Заметим, что если в (1) вместо χ подставить свободную функцию χ_0 , то мы получим хартри-фоковскую энергию системы. Отличие χ от χ_0 определяет в (1) корреляционные поправки к E_0 . Разницу между χ и χ_0 можно характеризовать функцией R , которую мы будем называть эффективным потенциалом взаимодействия частиц, вводя его формулой

$$\chi^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \chi_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) - R(\mathbf{k}, \omega) \quad (9)$$

или в более привычном виде

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = \chi_0(\mathbf{k}, \omega) \kappa(\mathbf{k}, \omega), \quad (10)$$

где

$$\kappa(\mathbf{k}, \omega) = (1 - R(\mathbf{k}, \omega) \chi_0(\mathbf{k}, \omega))^{-1}. \quad (10')$$

В приближении хаотических фаз на месте R стоит обычный потенциал \mathcal{V} . Чтобы вывести основное уравнение всего метода — функциональное уравнение для эффективного потенциала R , осталось сделать один несложный шаг — подставить в левую часть уравнения (5) формулу (1), а в правую — анзатц (9). Тогда после простых преобразований мы приходим к замкнутому функциональному уравнению для эффективного потенциала R [12, 13, 15]:

$$R(\mathbf{k}, \omega) = \mathcal{V}(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \frac{\delta^2}{\delta \rho(\mathbf{k}, \omega) \delta \rho(-\mathbf{k}, -\omega)} \times \\ \times \int \int_C \mathcal{V}(\mathbf{q}) \chi(\mathbf{q}, q_0) \frac{d^4 q dg}{(2\pi)^4 g}. \quad (11)$$

Отметим, что анзатц (9), в котором все влияние взаимодействия на функцию отклика χ относится на счет эффективного потенциала взаимодействия R , является естественным для идеологии подхода Хоэнберга — Кона — Шема [7, 8], принятой в теории твердого тела. Но возможны и иные анзатцы, скажем, ферми-жидкостной [16], когда в качестве χ_0 берется функция отклика системы невзаимодействующих квазичастиц с эффективной массой $M^* \neq M$, и тогда роль взаимодействия частиц оказывается двойкой: с одной стороны, оно приводит к перенормировке эффективной массы квазичастиц, с другой — к появлению эффективного, но уже несколько иного потенциала взаимодействия между квазичастицами. Этот анзатц сложнее анзатца (9), но у него есть и свои преимущества, о которых мы не будем здесь говорить.

Если бы функциональное уравнение (11) удалось решить, то мы смогли бы напрямую вычислить сжимаемость системы $K = dP/d\rho$

(давление $P = -\partial E_0/\partial V$), ибо она, как известно [14], связана со статическим пределом

$$\chi^{-1}(0, 0) = -K/\rho. \quad (12)$$

Подставляя сюда (9), нетрудно найти

$$K = \frac{2}{3} \varepsilon_F^0 + \rho R(0, 0). \quad (13)$$

Вычисляя $R(0, 0)$, мы должны взять функциональную производную $\frac{\delta}{\delta \rho(0)}$, а она совпадает с $d/d\rho$, и потому из (11) следует такое интегро-дифференциальное соотношение для сжимаемости системы ($q = = (\mathbf{q}, q_0)$):

$$K = \frac{2}{3} \varepsilon_F^0 - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \int_C \int \mathcal{Y}(\mathbf{q}) \frac{\chi_0(q)}{(1-R(q)\chi_0(q))} \frac{dg}{g} \frac{d^4q}{(2\pi)^4}. \quad (13')$$

Функциональное уравнение (11) представляет собой компактную запись системы зацепляющихся уравнений для эффективного потенциала R и его функциональных производных. Эта система, рассмотренная подробнее в приложении В, эквивалентна точной системе зацепляющихся уравнений для многочастичных функций Грина или системе уравнений теории связанных кластеров [3, 4]. Но именно замкнутая форма уравнения (11) позволяет сформулировать новую схему приближенного решения фундаментальной системы уравнений теории многих тел, применимой и для нормальных ферми-систем, и для сверхтекучих, и для бозе-жидкости.

2. ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ

В предыдущем разделе было получено замкнутое функциональное уравнение для эффективного потенциала взаимодействия частиц $R(k, \omega)$. Это уравнение можно развернуть в цепочку уравнений, связывающих его с функциональными производными $\frac{\delta R}{\delta \rho}$, $\frac{\delta^2 R}{\delta \rho^2}$ и т. д.

Начнем с первого уравнения этой цепочки [15] (подробности вывода да вынесены в приложение В):

$$\begin{aligned} R(k) = & \mathcal{Y}(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \int_C \int \mathcal{Y}(\mathbf{q}) [\chi(\mathbf{q}) I^2(q, k) \chi(q) + \\ & + 2\chi(q) I^1(q, k) T(q+k) I^1(k, q) \chi(q) + \\ & + 2\chi(q) I^1(q, k) \chi(q+k) O^1(k, q) \chi(q) + \\ & + 2\chi(q) O^1(q, k) \chi(q+k) I^1(k, q) \chi(q) + \\ & + 2\chi(q) O^1(q, k) \chi(q+k) O^1(k, q) \chi(q) + \\ & + \chi(q) O^2(q, k) \chi(q)] \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g}. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь введены обозначения $T(q) = R(q) \kappa(q) = R(q)/(1 - R(q)) \times \chi_0(q_1)$;

$$I^1(q, k) = \frac{\delta \chi_0(q)}{\delta \rho(k)}; \quad I^2(q, k) = \frac{\delta^2 \chi_0(q)}{\delta \rho(k) \delta \rho(-k)}; \quad (15)$$

$$O^1(q, k) = \frac{\delta R(q)}{\delta \rho(k)}; \quad O^2(q, k) = \frac{\delta^2 R(q)}{\delta \rho(k) \delta \rho(-k)}.$$

Мы видим, что потенциал R выражается через блоки $O^1 = \frac{\delta R}{\delta \rho}$ и $O^2 = \frac{\delta^2 R}{\delta \rho \delta \rho}$. Для них тоже можно получить уравнения, если снова проварьировать обе части (14), но при этом в дело войдут новые блоки O^3, O^4 и т. д. В итоге возникнет бесконечная цепочка уравнений, связывающих разные функциональные производные потенциала R . Наиболее частый прием, употребляемый при решении подобных систем, заключается в отбрасывании вклада всех многочастичных блоков, начиная с некоторого. В результате система замыкается и решается численными методами. Мы поступим иначе.

Выше мы уже видели, что функциональная производная по ρ в длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ сводится к частной. В координатном представлении это означает, что

$$\int \frac{\delta F(z)}{\delta \rho(x)} dx = \frac{dF(z)}{d\rho}. \quad (16)$$

При произвольных k точного соотношения между вариационной производной и частной уже нет. Но можно найти приближенную связь между ними, если учесть, что основные характеристики системы с сильным взаимодействием локальны, т. е. произвольный функционал $F(z)$ зависит от плотности ρ в окрестности той же точки z , и потому в однородной системе можно записать приближенное соотношение

$$\frac{\delta F(z)}{\delta \rho(x)} = \delta(x - z) \frac{dF(z)}{d\rho}. \quad (17)$$

Соотношение (17), являясь приближенным, выполняется, как видно из (16), интегрально. Приближение (17) мы будем называть локальным по терминологии [17], где оно впервые было применено. В общем виде процедура решения функционального уравнения (11) выглядит теперь так. Записываются первые k уравнений цепочки. Входящие в последнее из них функциональные производные вычисляются в соответствии с рецептом локального приближения (17), в результате чего эти уравнения, очевидно, замыкаются. Чем выше номер уравнения, в котором используется аппроксимация (17), тем точнее определяется амплитуда R , так как погрешность вносит коррелятор более высокого порядка. (К обсуждению этого вопроса мы еще вернемся позднее.)

Как показывают расчеты [12, 13], применение локального приближения уже на первом этапе, когда остается только одно уравне-

ние, позволяет получить весьма точные результаты. Делается это следующим образом.

Запишем в соответствии с (17) приближенное равенство для второй функциональной производной $\chi(x = r, t)$:

$$\frac{\delta^2 \chi(x, x')}{\delta \rho(x_1) \delta \rho(x_2)} = \frac{1}{2} [\delta(x - x_1) \delta(x' - x_2) + \delta(x - x_2) \delta(x' - x_1)] \frac{d^2 \chi(x, x')}{d\rho^2}. \quad (18)$$

Переходя к импульсному представлению, находим отсюда приближенное соотношение

$$\frac{\delta^2 \chi(q)}{\delta \rho(k) \delta \rho(-k)} = \frac{d^2 \chi(q+k)}{d\rho^2}, \quad (19)$$

которое становится точным при $k \rightarrow 0$.

Подставляя это соотношение в (11), мы приходим к замкнутому интегродифференциальному уравнению для эффективного потенциала R взаимодействия частиц. Это нулевое приближение к точному эффективному потенциалу R мы обозначим R^0 . Тогда

$$R^0(k) = \mathcal{V}(k) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \int_C \mathcal{V}(q) \frac{\chi_0(q)}{(1-R(q)\chi_0(q))} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g}. \quad (20)$$

Как видно отсюда, эффективный потенциал R не зависит от частоты k_0 , поскольку исходное взаимодействие \mathcal{V} является незапаздывающим. Чтобы улучшить сходимость интеграла в (20), полезно выделить из него фоковский вклад, пропорциональный χ_0 . Тогда после простых выкладок (20) преобразуется к такому виду:

$$R^0(k) = \varphi(k) - (1/2) \frac{d^2}{d\rho^2} \int \mathcal{V}(q-k) \frac{\chi_0^2(q) R(q)}{(1-R(q)\chi_0(q))} \frac{d^4 q dg}{(2\pi)^4 g}, \quad (21)$$

где

$$\varphi(k) = \mathcal{V}(k) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \int \mathcal{V}(q-k) \chi_0(q) \frac{d^4 q}{(2\pi)^4}. \quad (22)$$

Интегрирование по q_0 выполняется здесь без помех, и мы получаем следующий результат [14]:

$$\varphi(k) = \mathcal{V}(k) + \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho \int_0^{2p_F} \int_{-1}^1 \mathcal{V}(q-k) \left(\frac{3q}{4p_F} - \frac{q^3}{16p_F^3} - 1 \right) \frac{q^2 dq dx}{(2\pi)^2}. \quad (23)$$

Как правило, оставшиеся интегрирования тоже могут быть выполнены аналитически. Так, для δ -образного потенциала $\mathcal{V}_0(k) \equiv \mathcal{V}_0$ мы получаем стандартный хартри-фоковский ответ $\varphi(k) = \mathcal{V}_0/2$.

Формула локального приближения для сжимаемости отличается от общей (13) только тем, что под интеграл вместо точного эффектив-

ного потенциала R входит R^0 — эффективный потенциал локального приближения:

$$K = K^0 - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \int \mathcal{V}(q) \frac{\chi_0^2(q) (R(q) - R^0(q))}{1 - R^0(q) \chi_0(q)} \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g}. \quad (24)$$

Здесь K^0 — сжимаемость, рассчитанная в локальном приближении:

$$K^0 = \frac{2}{3} \varepsilon_F^0 - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \int \int_C \mathcal{V}(q) \frac{\chi_0(q)}{(1 - R^0(q) \chi_0(q))} \frac{dg}{g} \frac{d^4q}{(2\pi)^4}. \quad (25)$$

Подынтегральная функция здесь обычно довольно быстро убывает с ростом q и q_0 , а на малых q , q_0 разность $(R - R^0)$ мала. Это обстоятельство и является одной из главных причин успеха локального приближения в описании состояния различных физических систем (см. ниже). На проблему вычисления сжимаемости можно взглянуть и чуть-чуть с иной точки зрения. Нетрудно убедиться, что $R^0(0) = \frac{d^2(E_0^0 - \tau)}{d\rho^2}$, где E_0^0 — энергия основного состояния, рассчитанная тоже в рамках локального приближения. С другой стороны, общие аналитические свойства функции отклика χ никак не нарушаются локальным приближением, в частности, не нарушается и дисперсионное соотношение между действительной и мнимой частью χ , приведенное в приложении А. А потому не нарушается и правило сумм для сжимаемости (А.5). Закрывая это обсуждение, мы можем сказать, что вместо точного функционального уравнения для χ мы получили относительно простое интегродифференциальное, не нарушая одно из основных условий согласования микроскопической теории. Заметим, что в ряде подходов, например в кластерном, автоматического выполнения правила сумм для сжимаемости нет.

Поскольку локальное приближение (17) становится точным в пределе $k \rightarrow 0$, то точность расчетов в его рамках будет тем выше, чем быстрее убывает потенциал $\mathcal{V}(\mathbf{k})$. Исходя из этого факта, следует ожидать, что кулоновская плазма, где $\mathcal{V}(\mathbf{k}) = 1/k^2$, будет описываться этим приближением лучше, чем газ твердых шаров, где $\mathcal{V}(\mathbf{k}) = \text{const}$. Это заключение, как мы увидим дальше, подтверждается численными расчетами.

У локального приближения есть и свои недостатки, но прежде, чем обсуждать их, посмотрим на конкретных примерах систем, для которых имеются монте-карловские расчеты уравнения состояния, как это приближение работает.

3. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ В ЛОКАЛЬНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ С МОНТЕ-КАРЛОВСКИМИ

а. Нейтронная система с отталкивательным взаимодействием Бете. В этом разделе на нескольких примерах мы продемонстрируем работоспособность локального приближения и сравним уравнения

состояния $\varepsilon^0(\rho)$, вычисленные с эффективным потенциалом R^0 с $\varepsilon_{\text{МК}}(\rho)$, найденными монте-карловскими методами. Хорошо известны монте-карловские расчеты уравнения состояния, сделанные для электронного газа [18] (модель «желе») и для системы нейтронов [19] с модельным взаимодействием Бете — одной из компонент (отталкивательный кор) — рейдовского NN -потенциала. Для ядерных приложений именно эти расчеты представляют наибольший интерес. Поэтому с них мы и начнем. Потенциал Бете имеет вид: $\mathcal{V}(r) = V_0 e^{-\mu r}/r$ ($V_0 = 9263$, 1 МэВ·фм, $\mu = 4$ фм $^{-1}$).

Расчеты в рамках предлагаемого подхода выполнены в работе [13]. Функция $\varphi(\mathbf{k})$ вычисляется аналитически:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{k}) = & -\frac{\pi V_0}{6} \left[-\frac{2}{k p_F} \ln \frac{(2p_F - k)^2 + \mu^2}{(2p_F + k)^2 + \mu^2} + \frac{2}{p_F^2} + \right. \\ & + \frac{(k^2 - 3\mu^2)}{4p_F^4} \ln \frac{((2p_F - k)^2 + \mu^2)((2p_F + k)^2 + \mu^2)}{k^2 + \mu^2} + \\ & \left. + \frac{\mu(\mu^2 - 3p_F^2)}{2kp_F^2} \operatorname{arctg} \frac{2k\mu}{(k^2 + \mu^2)^2/4p_F^2 + \mu^2 - k^2} \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

Для решения уравнения (21) удобно переписать его как уравнение в конечных разностях:

$$\begin{aligned} R^0(\mathbf{k}, g_{n+1}) = & R^0(\mathbf{k}, g_n) + (g_{n+1} - g_n) \varphi(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \int_{g_n}^{g_{n+1}} \int \mathcal{V}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \times \\ & \times \frac{\chi_0^2(q) R^0(\mathbf{q}, g)}{(1 - R^0(\mathbf{q}, g) \chi_0(q))} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g}. \end{aligned} \quad (27)$$

Уравнение (27) для $R^0(g_{n+1})$ при уже найденном значении $R^0(g_n)$ можно решать итерациями, определяя таким образом $R^0(g_n)$ вплоть до реального значения g . В результате мы получаем эффективное взаимодействие R^0 как функцию переменных k , ρ и g и по формуле (1) находим энергию E_0 , отнесенную к единице объема. С другой стороны, E_0 можно вычислить через сжимаемость K , исходя из соотношения (13). Сравнение этих двух результатов дает возможность оценить точность численного решения уравнения (27). Определенная таким способом погрешность численных расчетов составляет около 3 %.

Основные результаты расчетов приведены в табл. 1. Все значения энергий отнесены к одному нейтрону, плотность нейтронной материи $\rho = p_F^3/3\pi^2$. В таблице приняты еще такие обозначения: τ — кинетическая энергия не взаимодействующих частиц, w_{HF} — хартри-фокковская потенциальная энергия, $\varepsilon_c^{(0)}$ — корреляционная энергия. Полная энергия $\varepsilon^0 = \tau + w_{\text{HF}} + \varepsilon_c^0$. Из таблицы видно, что при нормальных плотностях ($\rho \sim 0,17$ фм $^{-3}$) корреляционная часть энергии в значительной мере компенсирует хартри-фокковскую, так что кине-

тическая энергия $\tau \sim \varepsilon_c^0$. При больших плотностях $\varepsilon_c^0 \gg \tau$. Таким образом, корреляции играют существенную роль при всех рассмотренных плотностях, и газовое приближение неприменимо. Этот вывод подтверждается и при рассмотрении сжимаемости системы.

Таблица 1. Энергия нейтронной материи, вычисленная в рамках локального приближения

p_F , фм ⁻¹	ρ , фм ⁻³	τ , МэВ	w_{HF} , МэВ	ε_c , МэВ	ε^0 , МэВ	f
1,71	0,17	36,5	231	-481	86,5	4
2,07	0,3	53	424	-305	173	6,3
3,1	1	119	1569	-915	773	18
3,9	2	189	3361	-1632	1919	28
5,1	4	300	7205	-2603	4902	45

Вклад взаимодействия в сжимаемость характеризуют обычно безразмерным параметром $f = p_F \frac{M}{\pi^2} R(0)$. Для газа твердых шаров константа f должна быть мала: $f \sim p_F a$, где a — длина рассеяния ($f \rightarrow 0$ при $p_F \rightarrow 0$). Но для рассматриваемой системы, как видно из последней колонки табл. 1, где приведены значения f , всюду $f > 1$. Это значит, что система не описывается газовым приближением. Причина такого поведения f проста: отношение импульса Ферми p_F к параметру μ , характеризующему радиус сил для табличных плотностей, не так уж мало: p_F/μ меняется от 1/3 до 1. В табл. 2

Таблица 2. Сравнение значений энергии нейтронной материи, рассчитанных разными методами

ρ , фм ⁻³	$\varepsilon_{МК}$, МэВ	ε^0 , МэВ	$\varepsilon_{FHNC}^{(1)}$, МэВ	$\varepsilon_{FHNC}^{(2)}$, МэВ
0,17	89	85,9	89	90
0,3	175	173	176	177
1	782	773	787	790
2	1976	1919	1847	1994
4	4916	4902	—	—

приведены результаты сравнения различных подходов к вычислению энергии нейтронной системы с потенциалом Бете. В первом столбце даны значения плотности, во втором — результаты монте-карловского расчета, выполненного в работе [19], в третьем — результаты локального приближения [13], затем — результаты кластерного подхода [20] в двух наиболее удачных вариантах Пандаришанде —

Бете и Джексона — Финберга. Сравнение показывает, что при малых плотностях кластерные результаты согласуются с «экспериментом» — монте-карловскими — несколько лучше, чем результаты локального приближения, при больших результаты локального приближения лучше воспроизводят эксперимент, нежели версия Пандарипанде — Бете, но несколько хуже, нежели версия Джексона — Финберга. При этом следует учесть, что объем кластерных вычислений намного больше того, который необходимо выполнить при численном решении уравнения (27).

Ядерная жидкость состоит из протонов и нейтронов и потому кроме локального взаимодействия нужно рассматривать еще и дальнедействующее — кулоновское. Кулоновская система — электронный газ неполяризованный и поляризованный — тоже рассматривалась монте-карловскими методами. Обратимся к сравнению результатов локального приближения с монте-карловскими.

б. Электронный газ (модель «желе»). Начнем с однородной неполяризованной системы, помещенной в однородную положительно заряженную среду, так что полный заряд всей системы равен нулю. Для описания такой среды обычно вместо плотности ρ вводят параметр $r_s = r_0/a_B$, где $a_B = \hbar^2/Me^2$ — боровский радиус. (Для реальных металлов r_s меняется от 2 до 6.) Параметр r_s определяет отношение потенциальной энергии электрона $\sim e^2/r_s$ и кинетической $\sim \hbar^2/2Mr_s^2$, и при $r_s \rightarrow 0$ характеристики системы могут быть вычислены в рамках теории возмущений. При больших $r_s > 1$ стандартная теория возмущений уже неприменима, довольно быстро начинает фальшивить и приближение случайных фаз, а вот локальное приближение работает достаточно хорошо, причем, как показывают расчеты, решать уравнение (24) можно с помощью итерационной процедуры [12]. В первой итерации в правую часть (24) вместо точной функции отклика подставляется функция χ_0 , даваемая соотношением (8). Результат вычисляется аналитически:

$$\varphi(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2} - \frac{\pi e^2}{3p_F^2} \left[\frac{k^2}{4p_F^2} \ln \left| 1 - \frac{4p_F^2}{k^2} \right| + \frac{2p_F}{k} \ln \left| \frac{2p_F + k}{2p_F - k} \right| + 1 \right], \quad (28)$$

а уравнение (24) имеет теперь вид ($g = e^2$):

$$R^0(\mathbf{k}) = \varphi(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \iint \frac{4\pi}{|\mathbf{q} - \mathbf{k}|^2} \frac{\chi_0^2(q) R^0(q)}{(1 - R^0(q) \chi_0(q))} \frac{d^4 q dg}{(2\pi)^4}. \quad (29)$$

Первая итерация φ_1 для эффективного потенциала R^0 вычисляется подстановкой в правую интегральную часть этого уравнения функции $\varphi(\mathbf{k})$, следующая — подстановкой φ_1 и т. д., энергия системы найдется подстановкой рассчитанного эффективного потенциала R^0 в основное соотношение (1). Наибольший интерес представляет корреляционная энергия системы — разность между точной и хартри-фоксовской. Обычно в таблицах корреляционную энергию относят

к одному электрону. В табл. 3 приведены результаты расчетов этой энергии, выполненных в различных работах. Здесь через ϵ_{RPA} обозначена корреляционная энергия, вычисленная в приближении хаотических фаз, через ϵ^0 — решение уравнения (29). Здесь же дана монте-карловская корреляционная энергия $\epsilon_{\text{МК}}$ [18], которую можно

Таблица 3. Корреляционная энергия ϵ на одну частицу неполяризованного электронного газа

r_s	ϵ_{RPA} , эВ	ϵ^0 , эВ	$\epsilon_{\text{МК}}$, эВ	$\epsilon_{\text{СС}}$, эВ	ϵ_{FHNC} , эВ
1	-2,14	-1,62	-1,62	-1,65	-1,86
2	-1,68	-1,23	-1,23	-1,23	-1,34
3	-1,44	-1,01	-1,01	-1,01	-1,07
4	-1,27	-0,87	-0,87	-0,87	-0,91
5	-1,16	-0,77	-0,77	-0,77	-0,80
6	-1,06	-0,69	-0,69	—	—
10	-0,84	-0,51	-0,51	-0,51	-0,51
20	-0,58	-0,31	-0,31	-0,31	—
50	-0,35	-0,17	-0,16	—	—

рассматривать как экспериментальную. В последних колонках таблицы приведены корреляционные энергии $\epsilon_{\text{СС}}$ и ϵ_{FHNC} , рассчитанные в рамках (exp S) theory и FHNC theory в работах [21, 22]. Из таблицы видно, что локальное приближение дает хорошее описание эксперимента в широком интервале плотностей, в то время как в FHNC theory область больших плотностей, где работает теория возмущений, воспроизводится хуже. Что касается сравнения с (exp S) theory, то результаты обоих подходов примерно одинаковы, но объем математической работы в (exp S) theory намного больше. Отметим, что, как показывает расчет [12], в области реальных электронных плотностей — вплоть до $r_s \sim 10$ — хорошо работает уже первая итерация $\varphi(\mathbf{k})$.

Все приведенные выше формулы легко обобщаются на тот случай, когда электронный газ полностью поляризован (монте-карловские результаты для $\epsilon_1(\rho)$ даны в той же работе [18]). Все изменения в формулах сводятся к следующему: плотность ρ_{\uparrow} теперь связана с импульсом p_F ферми-соотношением $\rho_{\uparrow} = p_F^3/6\pi^2$, а функция отклика $\chi_{\uparrow}^0 = (1/2)\chi_0(p_F)$, где χ_0 дается соотношением (8), а множитель 1/2 возникает из-за отсутствия суммирования по спинам частиц. Отнесенная к единице объема энергия взаимодействия W_{\uparrow} поляризованного электронного газа равна

$$W_{\uparrow} = W_{\uparrow}^{\text{HF}} - \frac{1}{2} \iint \mathcal{V}(q) [\chi_{\uparrow}^0 / (1 - R_{\uparrow\uparrow} \chi_{\uparrow}^0) + 2\pi\rho\delta(\omega)] \frac{d^4q dg}{(2\pi)^4 g}, \quad (30)$$

где W_{\uparrow}^{HF} — хартри-фоковская часть W_{\uparrow} , а $R_{\uparrow\uparrow} = \frac{\delta^2 W}{\delta\rho_{\uparrow} \delta\rho_{\uparrow}}$.

На основе (30) легко стандартным способом получить уравнение локального приближения для эффективного потенциала:

$$R_{\uparrow\uparrow}^0(k) = \varphi_{\uparrow\uparrow}(k) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho_{\uparrow}^2} \int \mathcal{V}^*(q-k) \times \\ \times \left[\frac{\chi_{\uparrow}^0(q) R_{\uparrow\uparrow}(q) \chi_{\uparrow}^0(q)}{1 - R_{\uparrow\uparrow}(q) \chi_{\uparrow}^0(q)} - \chi_{\uparrow}^0(q) \right] \frac{d^4 q dg}{(2\pi)^4 g}; \quad (31)$$

$$\varphi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2} - \frac{2\pi e^2}{p_F^2} \left(\frac{k^2}{12p_F^2} \ln \left| \frac{4p_F^2 - k^2}{k^2} \right| + \frac{2p_F}{k} \ln \left| \frac{2p_F + k}{2p_F - k} \right| + \frac{1}{3} \right). \quad (32)$$

Результаты решения уравнений (30) и (31) приведены вместе с монте-карловскими [18] в табл. 4. Обозначения здесь практически те же, что и в табл. 3.

Таблица 4. Корреляционная энергия ε на одну частицу поляризованного электронного газа

r_s	$\varepsilon_{МК}$, эВ	$\varepsilon(0)$, эВ	r_s	$\varepsilon_{МК}$, эВ	$\varepsilon(0)$, эВ
0,1	-1,70	-1,72	4	-0,41	-0,47
0,5	-1,10	-1,10	5	-0,36	-0,42
1	-0,83	-0,86	6	-0,32	-0,38
2	-0,60	-0,66	10	-0,21	-0,29
3	-0,48	-0,55	20	-0,10	-0,19

Выше всюду в качестве экспериментального уравнения состояния использовалось монте-карловское. Возникает естественный вопрос — зачем нужны новые методы расчета, если есть уже достаточно надежные, хотя и громоздкие. Конечно, метод Монте-Карло весьма мощный и очень нужный, но и он не всемогущ. Мы знаем, что его недостатки обнажаются, когда имеешь дело со сложными — реалистическими — потенциалами взаимодействия нуклонов или атомов. Но даже в кулоновской плазме он не всегда на высоте: так, монте-карловские расчеты дают, что первый фазовый переход — ферромагнитный в электронном газе — происходит при $r_s = 70$ [18], однако еще раньше при $r_s \sim 10$ в этом газе возникает волна спиновой плотности с волновым вектором $k_c \sim p_F$, т. е. происходит антиферромагнитный фазовый переход (см. ниже). На монте-карловской фазовой диаграмме он отсутствует.

Подведем краткие итоги. Как мы видели, локальное приближение при всей его простоте вполне конкурентоспособно в «борьбе» с остальными микроскопическими подходами, что позволяет этим методом рассчитывать и другие характеристики ферми-систем: их одночастичные спектры, эффективное взаимодействие частиц.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Начнем с последнего. В нерелятивистской системе, спин которой $S = 0$, такое взаимодействие характеризуют два скаляра: $1_1 \cdot 1_2$ и $\sigma_1 \cdot \sigma_2$. При $S \neq 0$ добавляется еще один: $(\sigma_1 \mathbf{S}) (\sigma_2 \mathbf{S})$. Коэффициенты при них — скалярные функции переданного импульса \mathbf{k} — определяют разнообразные свойства ферми-систем, в частности магнитные и квадрупольные моменты нечетных ядер.

Для вычисления компонент эффективного взаимодействия частиц удобно ввести векторы $\rho = (\rho_0, \rho_3)$ и $\delta \mathbf{V}_0 = \Psi^+ \sigma_i \Psi \delta V_i^0$, где $\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ и $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Обобщая формулы разд. 1, можно записать ($i = 0, 3$):

$$\delta \rho_i = (\chi_{ik} \delta V_k^0); \quad (33)$$

$$\delta^2 E_0 = -1/2 (\delta V_i^0 X_{ik} \delta V_k^0). \quad (34)$$

Для бесспиновой системы матрица χ_{ik} диагональна. Ее компонента χ_{00} есть не что иное, как обычная функция линейного отклика χ , рассматривавшаяся в предыдущем разделе; χ_{33} — спиновая компонента матрицы $\hat{\chi}$. Очевидно, что матрица взаимодействия \hat{R} в этой системе тоже диагональна, и

$$\chi_{00}^{-1} = \chi_0^{-1} - R; \quad \chi_{33}^{-1} = \chi_0^{-1} - R_s. \quad (35)$$

Уравнение для R уже решалось в предыдущих разделах. Но там мы обсуждали в основном лишь само уравнение состояния, здесь же вначале поговорим о поведении самой функции R , ибо в поведении разных компонент эффективного потенциала много общего.

На рис. 1 приведены два графика функции $f(\mathbf{k}) = p_F \frac{M}{\pi^2} R(\mathbf{k})$ для модельных нейтронных систем с разными потенциалами NN -взаимодействия. Одна — с потенциалом Бете (1) $\mathcal{V}(r) = V_0 e^{-\mu r}/r$ ($V_0 = 9263$ МэВ·фм, $\mu = 4,2$ фм $^{-1}$, плотность $\rho = 0,17$ фм $^{-3}$), другая — с потенциалом Рейда с мягким кором: $\mathcal{V}(r) = [-14,95 \exp(-0,7r) - 2358 \exp(-2,8r) + 9263 \exp(-4,9r)]/r$ (плотность $\rho = 0,02$ фм $^{-3}$). Видно, что в области малых k кривые ведут себя по-разному: в то время как в системе с потенциалом Бете эффективное взаимодействие является отталкивательным, в системе с потенциалом Рейда оно притягательно, причем, как показывают вычисления, с ростом плотности это притяжение растет и $f(0)$ достигает значения -1 , при котором сжимаемость обращается в нуль, а затем превосходит и его. Теперь в одной из точек внутри области интегрирования по q и q_0 подынтегральная функция в уравнении для R обращается в бесконечность, а результат численного интегрирования становится чув-

ствительным к выбору процедуры интегрирования, ибо одна из опорных точек может оказаться непосредственно вблизи полюса и внести слишком большой вклад, искажающий весь результат. К более подробному обсуждению этой проблемы мы вернемся позже, а сейчас обратимся к вычислению спин-спиновой компоненты R_s

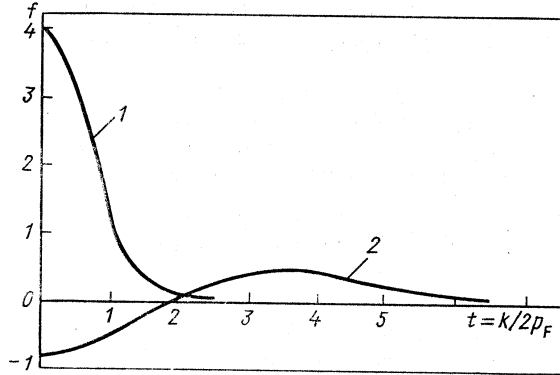


Рис. 1. Безразмерная амплитуда взаимодействия в нейтронных системах

эффективного потенциала взаимодействия. Чтобы найти ее, перепишем (34) в виде

$$\delta^2 E_0 = -1/2 (\delta\rho_i \chi_{ik}^{-1} \delta\rho_k) \quad (36)$$

и проварируем (1) дважды по ρ_3 . Тогда получим

$$R_s(\mathbf{k}) = -(1/2) \frac{\delta^2}{\delta\rho_3(k) \delta\rho_3(-k)} \int \int_C \mathcal{Y}(\mathbf{q}) \chi_{00}(q) \frac{d^4q dg}{(2\pi)^4 g}. \quad (37)$$

Вариационные производные можно вычислить, пользуясь матричными формулами $\delta\hat{\chi} = -\hat{\chi}\delta\hat{\chi}^{-1}\hat{\chi}$; $\delta^2\hat{\chi} = 2\hat{\chi}\delta\hat{\chi}^{-1}\hat{\chi}\delta\hat{\chi}^{-1}\hat{\chi} - \hat{\chi}\delta^2\hat{\chi}^{-1}\hat{\chi}$. Для бесспиновой системы частиц это дает

$$\frac{\delta^2\chi_{00}}{\delta\rho_3 \delta\rho_3} = 2\chi_{00} \frac{\delta\chi_{03}^{-1}}{\delta\rho_3} \chi_{33} \frac{\delta\chi_{30}^{-1}}{\delta\rho_3} - \chi_{00} \frac{\delta^2\chi_{00}^{-1}}{\delta\rho_3 \delta\rho_3} \chi_{00}. \quad (38)$$

Здесь использовано то обстоятельство, что функция χ_{ik} диагональна при $S = 0$ (это не относится к функциональным производным $\hat{\chi}$). Теперь воспользуемся еще тем обстоятельством, что согласно (36) $\chi_{ik}^{-1} = -\frac{\delta^2 E_0}{\delta\rho_i \delta\rho_k}$. Варируя это равенство еще раз, а затем меняя порядок варьирования, нетрудно получить:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\chi_{03}^{-1}}{\delta\rho_3} &= -\frac{\delta^3 E_0}{\delta\rho_3 \delta\rho_3 \delta\rho_0} = -\frac{\delta\chi_{33}^{-1}}{\delta\rho_0}; \\ \frac{\delta^2\chi_{00}^{-1}}{\delta\rho_3 \delta\rho_3} &= -\frac{\delta^4 E_0}{\delta\rho_3 \delta\rho_3 \delta\rho_0 \delta\rho_0} = -\frac{\delta^2\chi_{33}^{-1}}{\delta\rho_0 \delta\rho_0} \end{aligned} \quad (39)$$

и

$$\frac{\delta^2 \chi_{33}^{-1}}{\delta \rho_0 \delta \rho_0} = 2\chi_{00} \frac{\delta \chi_{33}^{-1}}{\delta \rho_0} \chi_{33} \frac{\delta \chi_{33}^{-1}}{\delta \rho_0} \chi_{00} - \chi_{00} \frac{\delta^2 \chi_{33}^{-1}}{\delta \rho_0 \delta \rho_0} \chi_{00}.$$

Последнюю формулу можно преобразовать так:

$$\frac{\delta^2 \chi_{33}}{\delta \rho_0 \delta \rho_0} = \frac{\chi_{00}^2}{\chi_{33}^2} \frac{\delta^2 \chi_{33}}{\delta \rho_0 \delta \rho_0} = \left(\frac{1 - R_s \chi_0}{1 - R \chi_0} \right)^2 \frac{\delta^2 \chi_{33}}{\delta \rho_0 \delta \rho_0}. \quad (40)$$

Таким образом, вычисление R_s тоже сводится к нахождению функциональных производных χ по обычной плотности ρ . А теперь применим к расчету функциональной производной $\delta^2 \chi_{33} / \delta \rho_0 \delta \rho_0$ локальное приближение. Тогда, подставив (40) в (37), найдем

$$R_s(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \int \int \mathcal{V}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \left(\frac{1 - R_s(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \chi_0(q - k)}{1 - R(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \chi_0(q - k)} \right)^2 \frac{d^2 \chi_{33}(q)}{d\rho^2} \frac{d^4 q dg}{(2\pi)^4 g}. \quad (41)$$

Относительно просто — итерациями — это уравнение решается в электронном газе при реальных металлических плотностях, т. е. при $r_s \ll 6$. Результат итерационного решения приведен на рис. 2, где изображена зависимость от r_s безразмерной амплитуды $g(0) = \frac{p_F M}{\pi^2} R_s(0)$ при значении $k = 0$. И здесь при вариации одного из параметров — в данном случае увеличении r_s — минимум $g(k)$ углубляется и в какой-то момент пересекает абсциссу -1 . В этой точке спиновая «жесткость» системы обращается в нуль. С нею обращается в нуль и частота $\omega(k)$ спиновой волны, а затем на каком-то участке волновых векторов $\omega(k)$ оказывается мнимой, в результате чего система вынужденно меняет свое основное состояние. Более подробное обсуждение этой проблемы мы отложим до раздела, посвященного фазовым переходам, а сейчас обратимся к вычислению эффективной массы M^* , характеризующей отличие спектра одночастичных возбуждений реальной ферми-системы от ферми-газового.

Одночастичное состояние можно рассматривать как основное при импульсе p , отличном от нуля. Если трактовать теперь все величины, входящие в теорию, как функционалы заполнения n_p , то развитую теорию легко обобщить и вычислить производную $\varepsilon(p) = \frac{\delta E_0}{\delta n_p}$.

Когда $p = p_F$, величина $\varepsilon(p)$ совпадает с химическим потенциалом μ . При $p \neq p_F$ ($\varepsilon_p - \mu$) отличается от ($\varepsilon_p^0 - \mu$) множителем M/M^*

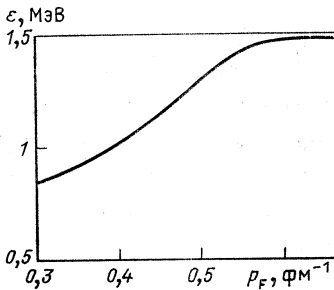


Рис. 2. Энергия связи на один нейтрон, вычисленная для реидовского потенциала с мягким кором

Чтобы рассчитать эффективную массу, мы должны взять функциональную производную от (1) не по плотности ρ , а по распределению n_p . При этом $\frac{\delta \tau}{\delta n_p} = \varepsilon_p^0$ и тогда

$$\varepsilon(p) = \varepsilon_p^0 - \frac{1}{2} \int \mathcal{Y}(q) \frac{\delta \chi(q)}{\delta n_p} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g}. \quad (42)$$

Пользуясь тем, что $\delta \chi = \kappa \delta \chi_0 \kappa + \chi \delta R \chi$, получаем

$$\varepsilon(p) = \varepsilon_p^0 - \frac{1}{2} \int \int \mathcal{Y}(q) \left[\kappa(q) \frac{\delta \chi_0(q)}{\delta n_0} \kappa(q) + \chi(q) M(q, p) \chi(q) \right] \frac{d^4 q dg}{(2\pi)^4 g}. \quad (43)$$

Уравнение для функции $M(q, p) = \frac{\delta R(q)}{\delta n_p}$ получается дифференцированием по n_p функционального уравнения (11) для R . В локальном приближении функциональные производные по ρ заменяются частными, но, к сожалению, при любой замене функциональных производных частными (с соответствующим сдвигом импульсов) в уравнении для $Z(k) = \left(\frac{\delta R(k)}{\delta n_p} \right)_{p=p_F}$ появляются расходимости, связанные с расходимостью второй производной по плотности ρ от $\frac{\delta \chi_0}{\delta n_p}$. Рассмотрим эту проблему подробнее, остановившись вначале на вычислении производной $\frac{\delta \chi_0}{\delta n_p}$, в деталях проведенном в работе [23]. Первое слагаемое в $\frac{\delta \chi_0}{\delta n_p}$ возникает при стандартном варьировании произведения GG по n_p . Оно выглядит так: $\left(\frac{\delta \chi_0(k, \omega)}{\delta n_p} \right)_I = 2(\varepsilon_p^0 - \varepsilon_{p-k}^0) / ((\varepsilon_p^0 - \varepsilon_{p-k}^0)^2 - \omega^2)$. После интегрирования по углам вектора k это дает ($\omega = i\omega$):

$$\left(\frac{\delta \chi_0}{\delta n_p} \right)_I \rightarrow I(k, \omega) = -\frac{M}{k} \frac{d}{dp} \left(\frac{1}{p} \ln \frac{(p+k/2)^2 + \omega^2 M^2/k^2}{(p-k/2)^2 + \omega^2 M^2/k^2} \right). \quad (44)$$

Эта часть вариационной производной гладкая, и при применении локального приближения с нею недоразумений не возникает. Но кроме нее в $\frac{\delta \chi_0}{\delta n_p}$ есть еще слагаемые, обязанные изменению правил обхода при переходе от функции отклика χ_0 основного состояния системы к функции отклика χ_0^* возбужденного — с одной частицей с импульсом $p > p_F$ над поверхностью Ферми или дыркой с импульсом $p < p_F$. Прямое вычисление этого вклада дает [23]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta \chi_0(q)}{\delta n_p} \right)_{II} &= (1 - n_{p-q}) \delta(\varepsilon_p^0 - \varepsilon_{p-q}^0 - \omega) \theta(\omega) - \\ &- n_{p-q} \delta(\varepsilon_p^0 - \varepsilon_{p-q}^0 - \omega) \theta(-\omega). \end{aligned} \quad (45)$$

После подстановки (44) и (45) в (42) получается такое уравнение:

$$M/M^* = 1 + \gamma(p) - \frac{1}{2} \int \int \mathcal{Y}(q) \{ I(q, w) \chi^2(q, w) + \\ + Z(q, w) \chi^2(q, w) \} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g}, \quad (46)$$

где

$$\gamma(p) = \frac{M}{4\pi^2 p_F} \int_0^{2p_F} \int_0^g q \mathcal{Y}'(q) \chi^2(q, \omega=0) dq \frac{dg}{g}. \quad (47)$$

В уравнение для $Z(k)$ входит вариационная производная $\frac{\delta^2 \gamma}{\delta p \delta p}$. Если попытаться рассчитать ее с помощью локального приближения (19), то, как легко проверить, результат вычислений разойдется из-за расходимости производной $\left(\frac{d\chi_0}{dp}(q, \omega=0) \right)_{q \rightarrow 2p_F}$, входящей в знаменатель $\chi(q, \omega=0)$. Можно несколько видоизменить процедуру вычислений аналогично тому, как выводятся точные уравнения для функциональных производных. В итоге мы придем к таким уравнениям:

$$Z = Z_1 + Z_2;$$

$$Z_1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dp^2} \int \int \mathcal{Y}'(\mathbf{q}-\mathbf{k}) [I(\mathbf{q}, q_0) \chi^2(\mathbf{q}, q_0) + \\ + \chi^2(\mathbf{q}, q_0) Z_1(\mathbf{q})] \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g}; \quad (48)$$

$$Z_2(k) = Z_2^{(0)}(k) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dp^2} \int \int \mathcal{Y}'(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \chi^2(\mathbf{q}, q_0) Z_2(\mathbf{q}) \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{dq}{g}, \quad (49)$$

где

$$Z_2^{(0)}(k) = -\frac{M}{p_F} \frac{d}{dp} \left[\int \int v(q) \left\{ \chi^2(q, w) \frac{\delta^2 n_{p-q}}{\delta p(k) \delta p(-k)} + \right. \right. \\ \left. \left. + 2 \frac{\delta \chi^2(q, w)}{\delta p(-k)} \frac{\delta n_{p-q}}{\delta p(k)} + \frac{\delta^2 \chi^2(q, w)}{\delta p(k) \delta p(-k)} n_{p-q} \right\} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \frac{dg}{g} \right], \quad (49')$$

причем производная по p берется в точке $p = p_F$.

Отметим, что для электронного газа в области малых значений r_s взаимодействие R можно считать кулоновским: $R(q) = 4\pi l^2/q^2$. Тогда интеграл по константе связи берется, и, пренебрегая вкладом Z , мы приходим к обычной формуле для эффективной массы, получаемой в приближении хаотических фаз [23, 24]:

$$\frac{M}{M^*} = 1 + \alpha/2 (\ln 1/\alpha - 2); \quad \alpha = e^2/lv_F^2.$$

Расчеты M^* по формулам (45) — (49) проводятся в настоящее время.

5. ЯДЕРНАЯ МАТЕРИЯ С РЕАЛИСТИЧЕСКИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

От рассмотренных в разд. 3 модельных систем реальная ядерная материя отличается в первую очередь сложной формой нуклон-нуклонного потенциала. Само понятие это применимо к ядерной материи лишь при тех плотностях, где еще не сказывается нуклонная структура. Характерная энергия для проявления ее есть, по сути дела, расстояние до первого возбужденного уровня нуклона, т. е. разность масс между частицей и нуклоном $\Delta = (M_\Delta - M_N) \sim 300$ МэВ. Пока энергия Ферми мала по сравнению с Δ , можно описывать NN -взаимодействие с помощью гамильтониана однобозонного обмена. Общий вид такого гамильтониана

$$H_{\text{int}} = \sum g_i \int \bar{\Psi}(\mathbf{r}) O_i \Psi(\mathbf{r}) \varphi_c(\mathbf{r}) d^3r, \quad (50)$$

где $\Psi, \bar{\Psi}$ — операторы уничтожения и рождения нуклона; φ — бозонный оператор; $O = 1$ — для скалярного мезона; γ_5 — для псевдоскалярного и т. д.

Чтобы построить уравнение состояния системы, т. е. зависимость энергии ε от плотности ρ , необходимо вычислить среднее по основному состоянию от гамильтониана (50). Вычисление этого среднего упрощается благодаря отсутствию мезонов в основном состоянии. Можно строго исключить вклад мезонных степеней свободы [25], перейдя от микроскопического гамильтониана (50) к не содержащему бозонных операторов эффективному нуклон-нуклонному гамильтониану аналогично преобразованию Хори в КЭД [26]. Хори показал, что при вычислении матричных элементов S -матрицы в системе фермионов между состояниями без γ -квантов гамильтониан $H_{\text{int}} = j_\mu A_\mu$ можно заменить четырехфермионным $H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} j_\mu j_\nu D_{\mu\nu}$, где $D_{\mu\nu}(k) = \delta_{\mu\nu} / k^2$ ($k^2 = k_0^2 - \mathbf{k}^2$).

При вычислении энергии системы метод Хори можно существенно упростить, если воспользоваться уравнением движения для бозонных операторов. Используем хорошо известную формулу Фейнмана — Хеллмана

$$g \frac{\partial E_0}{\partial g} = \langle H_{\text{int}} \rangle, \quad (51)$$

где H_{int} дается формулой (50).

С помощью уравнений движения

$$D^{-1}(\hat{k}) \varphi(x) = -g_1 \Psi_N^+(x) O_i \Psi_N(x) \quad (52)$$

исключаем входящий в искомое среднее бозонный оператор φ :

$$\varphi(x) = -g_i \int D(x-y) \Psi_N^+(y) O_i \Psi_N(y) d^4y, \quad (53)$$

где $D(k) = (k^2 - \mu^2)^{-1}$ ($D(\mathbf{k}, 0) = -1/(\mathbf{k}^2 + \mu^2)$). После подстановки этого выражения в формулу (50) получим:

$$H_{\text{int}} = -g_i^2 \Psi_N^+(x) O_i \Psi_N(x) \Psi_N^+(y) O_i \Psi_N(y) D(x-y). \quad (54)$$

Введя теперь эффективную константу связи $\lambda = g_i^2$, мы можем переписать (50) в соответствии с (51):

$$\lambda \frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \langle H_{\text{eff}} \rangle, \quad (55)$$

причем эффективный гамильтониан взаимодействия H_{eff} определяется формулой

$$H_{\text{eff}} = -\frac{1}{2} \lambda \Psi_N^+(x) O_i \Psi_N(x) \Psi_N^+(y) O_i \Psi_N(y) D(x-y). \quad (56)$$

Полученное среднее отличается от того, что стоит в формуле (1) в двух пунктах: 1) незападывающий потенциал заменен на D -функцию, в принципе зависящую от частоты ω ; 2) кроме скалярной функции отклика λ (в нерелятивистском пределе сюда дает вклад обмен σ - и ω -мезонами) в ответ входит и спиновая (благодаря обмену пионом).

Надо сказать, что существование зависящих от спиновых переменных вкладов в энергию W создает большие трудности в любой микроскопической теории — монте-карловские результаты с обменными потенциалами отсутствуют, а кластерное разложение только недавно обобщено на тот случай, когда потенциал \mathcal{V} зависит от суммарного спина частиц. Посмотрим на примере пионного обмена, приводящего к тензорным силам, как с этой проблемой справляется локальное приближение. Итак, путь в потенциале однобозонного обмена учитывает σ -, ω - и π -обмен. Тогда выражение для полной энергии ядерной материи можно записать следующим образом:

$$E_0 = E_H - \frac{1}{2} (\mathcal{V} \chi) - \frac{1}{2} (\mathcal{V}_t \chi_t); \quad (57)$$

$$E_H = \tau + \frac{1}{2} (\rho \mathcal{V} \rho) + \frac{1}{2} (\rho_t \mathcal{V}_t \rho_t), \quad (58)$$

где χ — обычная функция линейного отклика; \mathcal{V} — скалярный нерелятивистский потенциал σ — ω -обмена; $\mathcal{V}_t(k) = f^2 \frac{k^2}{\mu^2(k^2 + \mu^2)}$ — потенциал однобозонного обмена ($f^2 = 1,1$); $\chi_t = \delta \rho_t / \delta V_t^0$; $\rho_t = \langle \sigma \mathbf{v} \rangle$; $\delta V_t = \psi^+ \sigma \mathbf{v} \psi \delta V_0$ и $\mathbf{v} = \mathbf{k}/k$. Введя двумерный вектор $\rho = (\rho_0, \rho_t)$, мы можем записать энергию взаимодействия в виде

$$W = -1/2 (\rho_i \chi_{ii}), \quad (59)$$

где матрица функции отклика χ_{ih} определяется соотношением (36):

$$\chi_{ih}^{-1} = \delta^2 W / \delta \rho_i \delta \rho_h.$$

Будем рассматривать нейтронную систему со спином $S = 0$. Тогда недиагональных компонент у эффективного взаимодействия нет, и, как и раньше, можно написать: $\chi^{-1} = \chi_0^{-1} - R$, а $\chi_t^{-1} = \chi_0^{-1} - R_t$, причем

$$R = \frac{\delta^2 n}{\delta \rho \delta \rho}; \quad R_t = \frac{\delta^2 W}{\delta \rho_t \delta \rho_t}. \quad (60)$$

Подставляя эти соотношения в (57), находим:

$$\left. \begin{aligned} R &= \mathcal{Y} - \frac{1}{2} \frac{\delta^2}{\delta \rho \delta \rho} (\mathcal{Y} \chi + \mathcal{Y}_t \chi_t); \\ R_t &= \mathcal{Y}_t - \frac{1}{2} \frac{\delta^2}{\delta \rho_t \delta \rho_t} (\mathcal{Y} \chi + \mathcal{Y}_t \chi_t). \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

В первом из этих уравнений локальное приближение применяется без проблем, и мы получаем

$$R(\mathbf{k}) = \mathcal{Y}(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \int \int [\mathcal{Y}(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \chi(q) + \mathcal{Y}_t(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \chi_t(q)] \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} dq. \quad (62)$$

Что касается второго, то здесь возможны два подхода. Первый, наиболее простой, связан с тем, что по сравнению с $\sigma - \omega$ -вкладом вклад π -мезона мал, и поэтому последний член во втором из уравнений (61) может быть учтен в рамках теории возмущений заменой χ_t на χ_0 . В то же время первое слагаемое можно преобразовать точно так же, как при выводе формулы (41) для спин-спиновой части эффективного потенциала взаимодействия частиц. В итоге получится такое уравнение для R_t :

$$\begin{aligned} R_t(\mathbf{k}) &= \mathcal{Y}_t(\mathbf{k}) - \\ &- \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} \int \left[\left(\frac{1 - R_t(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \chi_0(q-k)}{1 - R(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \chi_0(q-k)} \right)^2 \frac{d^2 \chi_t}{d\rho^2} \mathcal{Y}(\mathbf{q}-\mathbf{k}) + \right. \\ &\left. + \mathcal{Y}_t(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \frac{d^2 \chi_0}{d\rho^2}(q) \right] \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} dg, \end{aligned} \quad (63)$$

которое решается численно теми же методами, что и уравнение для R .

Более трудоемкий, но одновременно и более точный способ решения уравнений для R_t заключается в том, чтобы трактовать ρ_t как новую переменную, аналогичную ρ . Тогда уравнение (61) для R_t в локальном приближении будет выглядеть следующим образом:

$$R_t^0 = \mathcal{Y}_t - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \rho_t^2} \int \int [\mathcal{Y}_0(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \chi_{00}(q) + \mathcal{Y}_t(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \chi_t(q)] \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} dg. \quad (64)$$

В итоге получится два связанных интегродифференциальных уравнения в частных производных. Соответствующие численные расчеты в настоящее время проводятся.

6. УСЛОВИЯ УСТОЙЧИВОСТИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Фазовая диаграмма любой реальной системы сложна — она содержит разнообразные фазовые переходы: жидкость — газ, сверхпроводник — нормальный металл и т. п. Поэтому знание условий устойчивости рассматриваемого состояния системы играет заметную роль в теории многих тел. Эти условия заключаются в обращении в нуль «жесткости» C_{η} системы по отношению к какому-либо типу ее возмущений. В теории ферми-жидкости хорошо известны условия устойчивости Померанчука, связывающие обращение жесткости C_{η} в нуль с соответствующим значением безразмерной локальной амплитуды взаимодействия квазичастиц у поверхности Ферми. К сожалению, теория ферми-жидкости Ландау, будучи феноменологической, не дает возможности установить, при какой плотности системы обращается в нуль та или иная жесткость C_{η} .

Иначе обстоит дело в данном подходе. Одно из его преимуществ по сравнению с большинством микроскопических теорий заключается в том, что эти условия возникают в нем естественно, ибо обращение в нуль жесткости означает обращение в нуль знаменателя соответствующей функции линейного отклика. Если, например, в газе с ростом его плотности при некотором значении ρ_{1c} сжимаемость становится равной нулю, то согласно (13) это означает, что при $\rho = \rho_{1c}$ впервые выполняется равенство

$$\frac{\rho F M}{\pi^2} R(k = \omega = 0, \rho_{1c}) = -1. \quad (65)$$

Оно определяет точку перегиба на кривой $\varepsilon(\rho)$. При больших ρ энергия ε расчитывается достаточно быстро, и потому на кривой $\varepsilon(\rho)$ есть еще одна точка перегиба ρ_{2c} , где сжимаемость снова обращается в нуль. В области плотностей $\rho_{1c} < \rho < \rho_{2c}$ система абсолютно неустойчива. Подобное поведение, как было показано в [27], обнаруживает нейтронная материя низкой плотности $\rho \sim 10^{-2}$ фм $^{-3}$. При столь низких плотностях вклад тензорных сил в энергию связи невелик из-за того, что тензорные силы содержат добавочный квадрат переданного импульса, а это — добавочный квадрат импульса Ферми p_F . Поэтому при малых плотностях естественно использовать скалярный потенциал Рейда с мягким кором

$$\mathcal{V}_{RSC}(r) = [-14,95 \exp(-0,7r) - 2358 \exp(-2,8r) + 9263 \exp(-4,9r)]/r, \quad (66)$$

обеспечивающий хорошее воспроизведение данных по низкоэнергетическому рассеянию нуклонов. (Для этого потенциала длина nn -рассеяния $a_{nn} = 23$ фм.)

В расчетах, выполненных с потенциалом \mathcal{V}_{RSC} , обнаружилось, что на кривой уравнения состояния разреженной нейтронной материи есть точка перегиба. Она отвечает плотности $\rho_c \sim 0,8 \cdot 10^{-2}$ фм $^{-3}$. При больших плотностях проведение прямых расчетов, как уже гово-

рилось, наталкивается на серьезные трудности: функция отклика χ на мнимой оси на контуре интегрирования имеет полюс, в связи с чем результат вычислений, скажем, энергии по формуле (1) начинает зависеть от способа разбиения интервала интегрирования. Тем не менее в учебниках кривые уравнения состояния — например вандер-ваальсовские — рисуют непрерывными. Поэтому и в микроскопической теории желательно так перестроить вычисления, чтобы в области абсолютной неустойчивости системы они давали однозначный результат. Посмотрим, как это сделать в рамках данного подхода. Чтобы сделать анализ более наглядным, заменим функцию $\chi_0(z, t)$ — комбинацию логарифмов и арктангенсов — более простым асимптотическим выражением, справедливым при $z, t > 1$:

$$\chi_0^{as}(z, t) = -\frac{p_F M / \pi^2}{1 + 3(z^2 + t^2)}. \quad (67)$$

Тогда для χ получим

$$\chi(z, t) = -\frac{p_F M / \pi^2}{z^2 + \kappa^2(t)}, \quad (68)$$

где $\kappa^2(t) = t^2 + (1 + p_F \frac{M}{\pi^2} R(t))/3$. Пока $\kappa > 0$, интеграл по z в (1) дает арктангенс, но стоит κ стать отрицательным, этот интеграл, будучи всегда интегралом в смысле главного значения, должен обратиться в нуль. На этом основании можно сформулировать рецепт взятия интеграла по z от χ в формуле (1) и ей подобных: область интегрирования, где знаменатель χ отрицателен, дает нулевой вклад в ответ и, следовательно, просто исключается из рассмотрения. В области, где знаменатель χ еще положителен, но мал, можно выделить особую часть аналитически — ее вклад пропорционален $\kappa^{-1/2}$, и, хотя $\kappa \rightarrow 0$ при некотором значении t_0 , в интервал по t заметного вклада окрестность t_c уже не дает. Кривая уравнения состояния нейтронной материи с потенциалом nn -взаимодействия (66), вычисленная в соответствии с этим рецептом, приведена на рис. 2.

Пока мы имели дело с фазовым переходом газ — жидкость. Но аналогичные методы могут быть применены и при исследовании фазовых переходов, в которых симметрия системы спонтанно нарушается. Как это делается, можно проследить на примере конденсации спиновых волн в электронном газе. Уравнение для обращения при каком-то значении в нуль спиновой жесткости выглядит аналогично (65):

$$1 - R_s(k_c, \omega = 0, \rho_c) \chi_0(k_c, \omega = 0) = 0 \quad (69)$$

с взаимодействием R_s , вычисленным на основе (41). В достаточно плотном газе его можно решать итерациями. Первая итерация φ_s вычисляется просто:

$$\varphi_s(k) = -\frac{\pi e^2}{3p_F^2} \left(\frac{k^2}{4p_F^2} \ln \left| \frac{4p_F^2 - k^2}{k^2} \right| + \frac{2p_F}{k} \ln \left| \frac{2p_F + k}{2p_F - k} \right| + 1 \right). \quad (70)$$

Для оценки параметров фазового перехода можно подставить (70) в (69). Тогда мы найдем такие значения критических параметров: $r_s^c \sim 10$, $k_c \sim p_F$. Учет поправочных членов ненамного сдвигает полученные величины [12].

Аналогичным образом можно рассмотреть антиферромагнитный фазовый переход в ядерной материи, когда при определенных значениях ρ_c и k_c обращается в нуль спин-изоспиновая жесткость $C_{\sigma\tau}$ [28]. Смена знака $C_{\sigma\tau}$ обязана тензорным силам, обусловленным однопионным обменом, и потому соответствующий переход обычно называют π -конденсатным. В отличие от перехода в электронной системе, где частицы бесструктурны, в ядерном антиферромагнитном переходе доминирует процесс с возбуждением Δ -резонанса — первого возбужденного состояния нуклона. Учет таких переходов приводит, в частности, к возникновению эффективных многочастичных NN -сил [28], в результате чего в дело входят более высокие функциональные производные $\frac{\delta^2\rho}{\delta V_0 \delta V_0}$ и т. д., вычисленные для фермиевской ступеньки $n_F = \theta(p - p_F)$. Соответствующему обобщению развиваемого подхода посвящен последний раздел обзора.

Пока что в этом разделе рассматривались довольно-таки однотипные фазовые переходы. Все они возникают в окрестности точек, где какая-нибудь из жесткостей обращается в нуль, хотя следует оговориться, что в некоторых случаях при более тщательном анализе фазовый переход второго рода может оказаться переходом первого рода [29].

В этой серии фазовых переходов особняком стоит переход, связанный со сменой знака эффективной массы M^* , когда интегральный член в (42) компенсирует свободный [30].

При этом $M/M^* \rightarrow 0$, т. е. вначале фермион «тяжелее», спектр $\varepsilon(p)$ выполаживается, а потом и вовсе становится немонотонным — в нем возникает минимум, подобный ротонному в жидком ^3He . В этом случае с ростом импульса Ферми наступает момент, когда при небольшом увеличении импульса квазичастиц у поверхности Ферми полная энергия $E_0(n_F(p))$ уменьшается и, следовательно, ферми-ступенька $n_F(p) = \theta(p - p_F)$ перестает описывать основное состояние системы — происходит фазовый переход. Возможно, такой переход происходит в разреженном электронном газе, где, как известно из расчетов [14], с ростом r_s отношение M/M^* уменьшается.

Несколько слов о микроскопической теории состояний, возникающих после точки фазового перехода. Чтобы построить такую теорию, надо сравнить энергии нескольких конкурирующих распределений $n(p)$ квазичастиц. Для проведения расчетов характеристик систем за точкой перехода, а некоторые из них после точки перехода становятся неоднородными, нужна известная модификация подхода, которая необходима, в частности, и для описания свойств реальных ядер. Этому посвящен следующий раздел обзора.

7. РЕАЛЬНЫЕ ЯДРА

Свойства ядерных систем надо изучать в координатном представлении. При этом возникает ряд проблем, которых не было раньше. Во-первых, самосогласованное поле $U(\mathbf{r}) = \frac{\delta W}{\delta \rho(\mathbf{r})}$ входит в функцию отклика χ_0 , как и в остальные характеристики системы, явно. От него, а значит, и от константы связи g зависит и плотность, и кинетическая энергия τ невзаимодействующих частиц. Чтобы избежать связанных с этим фактом усложнений, в [31] было предложено накладывать на систему дополнительное внешнее поле U_e такой амплитуды, чтобы плотность системы при реальном значении константы $g = g_0$ была той же, что и при $g = 0$. Это достигается, если выбрать

$$U_e(\mathbf{r}) = (g_0 - g) \left(\frac{\delta W}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right)_{g_0}, \tag{71}$$

т. е. при $g = 0$ надо наложить на систему такое внешнее поле, которое действует (как самосогласованное) при реальном значении g_0 , а при $g = g_0$ не накладывает никакого вове. Это будет означать, что и плотность $\rho(\mathbf{r})$, и кинетическая энергия невзаимодействующих частиц при $g = 0$ и $g = g_0$ будут одинаковы. Так как поле U_e является заданным, то поле δH будет пропорционально плотности системы, и потому оно вообще не будет входить во вторые вариационные производные W по ρ , определяющие уравнение для эффективного потенциала взаимодействия

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\delta^2 W}{\delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}')}. \tag{72}$$

Это утверждение нуждается в некоторых пояснениях. Функция отклика $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ в конечной системе определяется соотношением

$$\delta \rho(\mathbf{r}, \omega) = \int \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \delta V^0(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}', \tag{73}$$

а аналог формулы (4) выглядит так:

$$\delta^2 E_0 = -1/2 \iint \delta V^0(\mathbf{r}, \omega) \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \delta V^0(\mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \tag{74}$$

Если ввести оператор $\chi^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, то (74) можно переписать в форме, эквивалентной (5), т. е. получить, что

$$\chi^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = - \frac{\delta^2 E_0}{\delta \rho(\mathbf{r}', \omega) \delta \rho(\mathbf{r}, -\omega)}. \tag{75}$$

Определив эффективный потенциал R соотношением

$$\chi^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \chi_0^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \tag{76}$$

или, что то же самое,

$$\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \int \chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega) R(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \tag{76'}$$

можно с помощью формулы (75) прийти к вариационной формуле $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\delta^2 W}{\delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}')}$, а отсюда к функциональному уравнению для R :

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}' | \omega) = \mathcal{Y}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{2} \frac{\delta^2}{\delta \rho(\mathbf{r}, \omega) \delta \rho(\mathbf{r}', \omega)} \iint \mathcal{Y}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega') d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\omega'. \quad (77)$$

Здесь, пожалуй, самое время обсудить проблему вычисления ядерной плотности $\rho(\mathbf{r})$. Она измеряется в опытах по упругому рассеянию быстрых электронов на ядрах. В самосогласованных подходах, опирающихся на использование теории возмущений, например хартри-фоковском, плотность частиц $\rho(\mathbf{r})$ совпадает с оболочечной ρ_{SM} :

$$\rho_{SM}(\mathbf{r}) = \sum n_{\lambda} \varphi_{\lambda}^2(\mathbf{r}), \quad (78)$$

где $\varphi_{\lambda}(\mathbf{r})$ являются собственными функциями оболочечного гамильтониана $H_{SM} = \frac{p^2}{2M^*} + U_{SM}(\mathbf{r})$, где эффективная масса M^* и самосогласованное поле $U(\mathbf{r})$ вычисляются с помощью хартри-фоковской вариационной процедуры. Аналогичные формулы для них используют и в феноменологическом методе Хартри — Фока с эффективными силами [32]. С другой стороны, в ферми-жидкостном подходе, даже самосогласованном, формулы типа (78) для $\rho(\mathbf{r})$ нет — приходится вводить добавочный неизвестный локальный заряд квазичастиц $e_q(k)$, функцию переданного импульса k лишь при $k = 0$, образующуюся в единицу [11]. Поэтому, применяя теорию конечных ферми-систем к описанию упругого рассеяния электронов, вводят дополнительное предположение, полагая $e_q = 1$ для всех переданных импульсов k . От этого недостатка свободен метод Кона — Шема [8], в котором равенство (78) служит для определения плотности частиц, причем оказывается, что оно минимизирует энергию системы, если одночастичный гамильтониан H^{KS} записать в форме

$$H^{KS} = p^2/2M_{KS} + U_{KS}(\mathbf{r}), \quad (79)$$

где $M_{KS} = M$; $U = \delta W/\delta \rho$. Кон-шевский одночастичный гамильтониан отличается от хартри-фоковского тем, что оператор кинетической энергии частиц совпадает со свободным, так как $M_{KS} = M$. Поэтому спектр одночастичных уровней ϵ_{λ}^{KS} мало похож на реальный, но зато кон-шевская плотность $\rho(\mathbf{r})$ может использоваться для описания электронного рассеяния. Данный подход в основе своей близок к кон-шевскому и поэтому неудивительно, что в проблеме описания плотности $\rho(\mathbf{r})$ результаты их рассмотрения оказываются практически идентичными, хотя цепочка рассуждений в развиваемом подходе несколько иная, нежели в кон-шевском.

Рассмотрим асимптотику $\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega \rightarrow \infty)$, полагая, что предел $R(\omega \rightarrow \infty)$ ограничен. Поскольку функция $\chi_0(\omega)$ убывает при

$\omega \rightarrow \infty$ пропорционально ω^{-2} , то интегральный член (76) вносит пренебрежимо малый вклад и в пределе $\omega \rightarrow \infty$ χ и χ_0 совпадают. С другой стороны, асимптотика χ может быть вычислена прямо из лемановского разложения (А.3). Пренебрегая ω_{s0} в знаменателе (А.3), можно так же, как это делается в однородной системе [14], провести суммирование по s , заменив $\omega_{0s}\rho_{00}$ на дивергенцию тока \mathbf{j} , и после вычисления коммутатора $[\rho, \text{div } \mathbf{j}]_{00}$ получить

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = -\Delta \rho(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) / \omega^2. \quad (80)$$

Очевидно, таков же и предел χ_0 ($\omega \rightarrow \infty$). А это значит, что плотность системы взаимодействующих частиц совпадает с плотностью системы невзаимодействующих, т. е. движущихся в самосогласованном поле $U(r) = \delta W / \delta \rho(r)$,

$$\rho(r) = \sum n_\lambda \psi_\lambda^2(r), \quad (81)$$

причем

$$\left[\frac{p^2}{2M} + U(r) \right] \Psi_\lambda(r) = \epsilon_\lambda^2 \psi_\lambda(r). \quad (81')$$

Так в данном подходе решается задача о вычислении плотности нуклонов в ядре. Конкретные вычисления функциональных производных $\frac{\delta \chi_0}{\delta \rho} \frac{\delta^2 \chi_0}{\delta \rho^2}$ проводятся так же, как и в однородной системе (см. приложение С), только не в импульсном, а в координатном представлении.

В конкретных вычислениях начинать, на наш взгляд, стоит с взаимодействия R_∞ , вычисленного для однородной среды. Локальное приближение будет состоять тогда в том, что плотность ρ , подставляемую в эту функцию [она входит туда через импульс Ферми $p_F(r) = (3\pi^2 \rho(r))^{1/3}$], мы будем считать зависящей от r в соответствии с формулой (81). Конечно, при более последовательном анализе следует учесть отличие $R(r, r')$ от $R_\infty(r - r')$, возникающее хотя бы от того, что в уравнении (14) должно быть учтено различие свободных функций χ_0 в конечной и бесконечной системах. Пример расчета для конечной системы в рамках нулевого приближения дан в работе [33], где рассчитывается кулоновская энергия ядер. Расчет позволяет (пока качественно) объяснить происхождение известной аномалии Нолена — Шиффера в кулоновских энергиях зеркальных ядер именно влиянием корреляционных эффектов.

В рамках рассматриваемого подхода могут быть вычислены и изменения ядерных плотностей нейтронов и протонов, происходящие при добавлении одного или нескольких нуклонов. Получающаяся из (81) и (81') формула для изменения плотности $\delta \rho = \delta_0 \rho + \chi_0 \frac{\delta U}{\delta \rho} \delta \rho$ или

$$\delta \rho(r) = \delta_0 \rho(r) + \int \chi_0(r, \mathbf{r}_1) R(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \delta \rho(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (82)$$

по сути дела та же, что и в теории конечных ферми-систем [11] или в методе Хартри — Фока с эффективными силами, с той лишь разницей, что у используемых здесь квазичастиц эффективная масса совпадает с затравочной, а весь вклад остаточного взаимодействия, как и в теории электронного газа Кона — Шема [8], включен в эффективный потенциал взаимодействия частиц. Формула, аналогичная (82), может быть написана для изменения спиновой плотности ядра $\rho_S(\mathbf{r})$ при добавлении нечетного нуклона. Разница лишь в том, что вместо скалярной в уравнение входит спиновая компонента эффективного потенциала. Знание $\delta\rho_S$ позволяет рассчитывать магнитные дипольные и октупольные моменты ядер.

8. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ. ВЫХОД ЗА РАМКИ СТАНДАРТНОГО ЛОКАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Как мы видели, локальное приближение достаточно хорошо работает в довольно разнообразных условиях. Некоторые конкретные объяснения этого факта были проанализированы выше, но есть причины и более общие. Если рассмотреть алгебраическую структуру системы, выписанной в приложении В, то нетрудно убедиться, что алгебраически символические уравнения для операторов O^n с $n \geq 3$ являются линейными, уравнение для O^2 — квадратным, а для O^1 — кубическим. Допустим, что алгебраические уравнения — квадратное для O^2 или кубическое для O^1 — мы хотим решать итерациями, представляя решения в виде цепной дроби. Рассмотрим для пояснения, скажем, квадратное уравнение $x^2 - ax + b = 0$ с дискриминантом $D = a^2 - 4b$ и запишем его в виде

$$x = b/(a - x).$$

Итерационная последовательность решений этого уравнения — цепная дробь: $x_0 = b/a$; $x_1 = b/(a - b/a)$; $x_2 = b/[a - b/(a - b/a)]$ — весьма быстро сходятся в широкой области изменения параметров a и b . Аналогичным образом можно построить и решение кубического уравнения. Вернемся теперь к символическим уравнениям для O^n . Решая их, мы можем каждый из этих операторов представить в виде суммы цепных дробей. После подстановки этих сумм в уравнение для эффективного потенциала R он тоже окажется суммой определенных цепных дробей. С этой точки зрения уравнение локального приближения (20) получается тогда, когда в этих суммах всюду операторы O^n заменяются их приближенными выражениями в соответствии с рецептом (17) $O^1 \rightarrow \frac{dR}{d\rho}$ $O^2 \rightarrow \frac{d^2R}{d\rho^2}$ и т. д. и, кроме того, все аргументы функций, стоящих в цепных дробях, приравняются к одному: $(q + k)$ [что и позволяет получить выражение $\frac{d^2\chi(q+k)}{d\rho^2}$] в формуле (20). Каждый из членов суммы цепных дробей, определяющей

операторы O^n , сходится, как и вся алгебраическая цепная дробь, довольно быстро, причем нигде не отбрасывается ни одно из слагаемых, в них только заменяются операторы O^n с достаточно большими номерами их приближенными выражениями в соответствии с (17). Но если отбросить одно или несколько слагаемых этой суммы, точность расчета заметно упадет. Именно поэтому плохо обрывать систему уравнений для операторов O^n — мы теряем вклад тех слагаемых, которые содержат O^{n+1} и O^{n+2} . Локальное приближение в каком-то виде этот вклад учитывает, и это дает ему определенные преимущества перед стандартным рецептом решения бесконечной цепочки связанных уравнений, обрывающем эту цепочку на каком-то звене.

Как уже говорилось, любая итерация алгебраического уравнения, представленная цепной дробью, приближает истинное его решение примерно с одной и той же степенью точности в широком интервале изменения параметров уравнения. В целом то же самое относится и к системе уравнений для потенциала R и его функциональных производных. И неудивительно, что ее итерационные решения, основанные на использовании локального приближения, аналогично цепным дробям воспроизводят «истинные» — монте-карловские — результаты в пределах одной и той же точности для широкого круга значений плотности ρ и константы связи g , несмотря на то, что никакого параметра теории возмущений в задаче нет. Конечно, если «присмотреться», то можно заметить, что точность локального приближения оказывается тем выше, чем выше удельный вес поляризационных эффектов, т. е. чем больше роль канала частица — дырка. В то же время в газовом пределе, где поляризационные эффекты несущественны, а интегралы набираются в области A больших по сравнению с фермиевскими 4-импульсами $k = (\omega, \mathbf{k})$, точность локального приближения оказывается недостаточной [27]. Напомним в связи с этим, что локальное приближение автоматически ведет к незапаздывающему эффективному потенциалу R , что, конечно, не соответствует реальной действительности, и именно это несоответствие и проявляется в газовом пределе.

Серьезный математический недостаток локального приближения заключается в том, что в нем мы навязываем функциональной производной функции отклика определенные свойства симметрии, ей не свойственные. Действительно, согласно (19) производные $\frac{\delta\chi(q)}{\delta\rho(k)}$ и $\frac{\delta\chi(k)}{\delta\rho(q)}$ равны. На самом деле, подобное равенство имеется вовсе не для вариационных производных χ , а для вариационных производных χ^{-1} , поскольку именно χ^{-1} является второй вариационной производной по ρ от полной энергии E_0 [см. (5)], и поэтому

$$\frac{\delta\chi^{-1}(x_1x_2)}{\delta\rho(x)} = \frac{\delta^3 E_0}{\delta\rho(x)\delta\rho(x_1)\delta\rho(x_2)} = \frac{\delta\chi^{-1}(x_1x)}{\delta\rho(x_2)}. \quad (83)$$

Вторая производная $\frac{\delta^2\chi}{\delta\rho\delta\rho}$ связана с производными χ^{-1} соотношением

$$\frac{\delta^2\chi(x_1, x_2)}{\delta\rho(x)\delta\rho(x')} = 2 \left[\int \int \chi(x_1, x_3) \frac{\delta\chi^{-1}(x_3, x_4)}{\delta\rho(x)} \chi(x_4, x_5) \frac{\delta\chi^{-1}(x_5, x_6)}{\delta\rho(x')} \chi \times \right. \\ \left. \times (x_6, x_2) - \frac{1}{2} \chi(x_1, x_3) \frac{\delta^2\chi^{-1}(x_3, x_4)}{\delta\rho(x)\delta\rho(x')} \chi(x_4, x_2) \right] \Pi dx_i. \quad (84)$$

Подставляя сюда выражения для $\frac{\delta\chi^{-1}}{\delta\rho}$ и $\frac{\delta^2\chi^{-1}}{\delta\rho\delta\rho}$, мы вместо (19) получаем:

$$\frac{\delta^2\chi(q)}{\delta\rho(k)\delta\rho(-k)} = 2\chi(q) \frac{\delta\chi^{-1}(q)}{\delta\rho(k)} \chi(q+k) \frac{\delta\chi^{-1}(q+k)}{\delta\rho(-k)} \chi(q) - \\ - \chi(q) \frac{\delta^2\chi^{-1}(q)}{\delta\rho(k)\delta\rho(-k)} \chi(q). \quad (85)$$

Если здесь для вычисления производных $\frac{\delta\chi^{-1}}{\delta\rho}$ и $\frac{\delta^2\chi^{-1}}{\delta\rho\delta\rho}$ использовать локальное приближение (19) и, получив

$$\frac{\delta\chi^{-1}(q)}{\delta\rho(k)} = \frac{d\chi^{-1}(q+k)}{d\rho}; \quad \frac{\delta^2\chi^{-1}(q)}{\delta\rho(k)\delta\rho(-k)} = \frac{d^2\chi^{-1}(q+k)}{d\rho^2}, \quad (86)$$

подставить этот результат в (84), а (84) — в основное уравнение (11) для эффективного потенциала, то решение построенного таким образом интегродифференциального уравнения уже будет зависеть от частоты ω . Не нарушая условия симметрии (83), это уравнение можно еще уточнить, если вычислить вариационные производные от χ_0 в лоб (см. приложение С), а локальное приближение использовать лишь для производных от потенциала R . Тогда уравнение для R будет выглядеть так:

$$R(k) = \mathcal{V}(k) - \frac{1}{2} \int \int \mathcal{V}(q) \left[\kappa(q) I^2(q, k) \kappa(q) + \right. \\ \left. + 2\kappa(q) I^1(q, k) T(q+k) I^1(q, k) \kappa(q) + \right. \\ \left. + 2\kappa(q) I^1(q, k) \kappa(q+k) \frac{dR(q)}{d\rho} \chi(q) + \right. \\ \left. + 2\chi(q) \frac{dR(k+q)}{d\rho} \kappa(q+k) I^1(q, k) \kappa(q) + \right. \\ \left. + 2\chi(q) \frac{dR(k+q)}{d\rho} \chi(q+k) \frac{dR(q)}{d\rho} \chi(q) + \right. \\ \left. + \chi(q) \frac{d^2R(q+k)}{d\rho^2} \chi(q) \right] \frac{d^4q dg}{(2\pi)^4 g}, \quad (87)$$

где $T = R\chi$; $I^1(q, k) = \frac{\delta\chi_0(q)}{\delta\rho(k)}$; $I^2(q, k) = \frac{\delta^2\chi_0(q)}{\delta\rho(k)\delta\rho(-k)}$.

Главное отличие уравнений (86) и (87) от основного уравнения (20) заключается в том, что решение и того, и другого уже зависит от частоты ω . Таким образом, устраняется один из очевидных недостатков локального приближения. Дальнейшие уточнения процедуры приближенного решения функционального уравнения (11) заключаются в рассмотрении трех точных уравнений для блоков R , O^1 и O^2 . Они, естественно, не замкнуты, так как сюда входят еще блоки O^3 и O^4 . Если последние вычислять в рамках локального приближения, то рассматриваемое трио замкнется, после чего его уже можно решать численными методами.

9. ВКЛАД Δ -РЕЗОНАНСНЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ В ЭНЕРГИЮ СВЯЗИ ЯДЕРНОЙ МАТЕРИИ

Функциональный подход, развитый в предыдущих разделах, можно существенно расширить, применив его, например, для микроскопического расчета сверхтекучих ферми-систем [34], для учета вклада ненуклонных степеней свободы, главную роль среди которых играет Δ -изобара, в энергию связи и другие характеристики ядерной материи [25]. В этом разделе мы рассмотрим последнюю проблему подробнее. Как показано в многочисленных исследованиях, начиная с [28], появление виртуальной Δ -изобары в промежуточных состояниях обуславливает возникновение эффективных многочастичных нуклон-нуклонных сил. Количественный подход к вычислению параметров этих сил может быть построен следующим образом. Запишем ядерный однобозонный гамильтониан с учетом $N\Delta$ -переходов:

$$H_{\text{int}} = \int [g_{NN}^i \rho_{NN}^i(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) + g_{N\Delta}^i \rho_{N\Delta}^i(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x})] d^3x, \quad (88)$$

где $\rho_{NN}^i = \Psi_N^\dagger O_i \Psi_N$; $\rho_{N\Delta}^i = \Psi_N^\dagger O_i \Psi_\Delta + \Psi_\Delta^\dagger O_i \Psi_N$. Члены $\rho_{\Delta\Delta}^i$ здесь опущены, поскольку константы $g_{\Delta\Delta}^i$, как следует из кваркового анализа, невелики по сравнению с g_{NN}^i и $g_{N\Delta}^i$.

Для простоты рассмотрения ограничимся гамильтонианом, содержащим Δ -резонансы и скалярные бозоны (очевидное сообщение на псевдоскалярный случай будет рассмотрено ниже):

$$H_{\text{int}} = \int [g_{NN} \rho_{NN}(\mathbf{x}) + g_{N\Delta} \rho_{N\Delta}(\mathbf{x})] \varphi(\mathbf{x}) d^3x. \quad (89)$$

Для исключения бозонных и ненуклонных степеней свободы используем уравнения движения, написанные в символической форме:

$$\begin{aligned} -D^{-1}\varphi &= i[\dot{H}_{\text{int}}, \varphi]; \\ G_{\Delta}^{-1}\Psi_{\Delta} &= -[H_{\text{int}}, \Psi_{\Delta}], \end{aligned} \quad (90)$$

где D и G_{Δ} — функции распространения φ -бозонов и Ψ_{Δ} -фермионов соответственно. Для бозонов будем иметь

$$-D^{-1}\varphi = g_{NN} \Psi_N^\dagger \Psi_N + g_{N\Delta} (\Psi_N^\dagger \Psi_{\Delta} + \Psi_{\Delta}^\dagger \Psi_N) \quad (91)$$

и, следовательно,

$$H_{\text{int}} = + \{ g_{NN}^2 \Psi_N^+ \Psi_N D \Psi_N^+ \Psi_N + 2g_{N\Delta} g_{N\Delta} \Psi_N^+ \Psi_N D (\Psi_N^+ \Psi_\Delta + \Psi_\Delta^+ \Psi_N) + g_{N\Delta}^2 (\Psi_N^+ \Psi_\Delta D \Psi_\Delta^+ \Psi_\Delta + 2\Psi_N^+ \Psi_\Delta D \Psi_\Delta^+ \Psi_N + \Psi_\Delta^+ \Psi_N D \Psi_\Delta^+ \Psi_N) \}. \quad (92)$$

Таким образом, после изгнания поля ϕ возник четырехфермионный гамильтониан с членами, соответствующими испусканию, поглощению и перерасеянию Δ -частиц (рис. 3). Отметим, что аналогичную

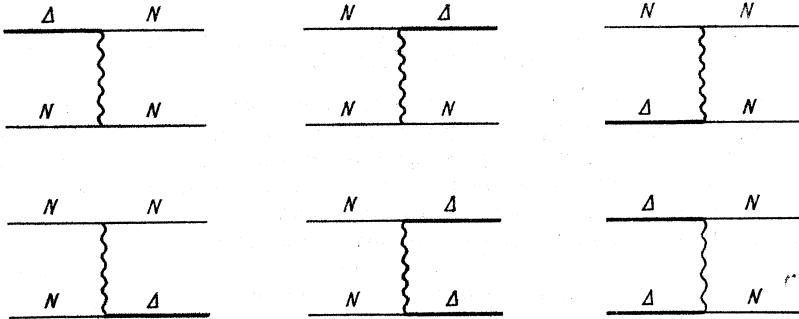


Рис. 3. Простейшие диаграммы $N\Delta$ -взаимодействия

форму гамильтониан (88) принимает и при учете мезон-изобарного взаимодействия.

Для перехода к нуклон-нуклонному гамильтониану остается «лишь» избавиться от полей Ψ_Δ и Ψ_Δ^+ . Из уравнения (90) получаем:

$$\Psi_\Delta = g_{N\Delta} G_\Delta \Psi_N \phi; \quad (93)$$

$$\Psi_\Delta^+ = g_{N\Delta} \tilde{G}'_\Delta \Psi_N^+ \phi. \quad (93')$$

Для удобства дальнейших выкладок заметим, что гамильтониан (88) с учетом уравнения (91) может быть записан в виде

$$H_{\text{int}} = -\phi D^{-1} \phi, \quad (94)$$

а само уравнение (91) при подстановке в него (93) и (93') оказывается замкнутым относительно ϕ :

$$\phi = [g_{NN} D \Psi_N^+ \Psi_N + g_{N\Delta}^2 D (\Psi_N^+ G_\Delta \Psi_N + \Psi_N^+ \tilde{G}'_\Delta \Psi_N) \phi]. \quad (95)$$

Ниже будет найдено решение уравнения (95) и с его помощью построен эффективный гамильтониан задачи.

Введем следующие обозначения:

$$\lambda_N = g_{NN}^2; \quad \lambda_\Delta^2 = g_{N\Delta}^2;$$

$$\hat{\rho} = \Psi_N^+ \Psi_N; \quad \hat{T} = \Psi_N^+ G_\Delta \Psi_N + \Psi_N^+ \tilde{G}'_\Delta \Psi_N; \quad \eta = \phi / g_{NN}. \quad (96)$$

Тогда уравнение (95) переписывается в виде

$$D^{-1}\eta = \rho + \lambda_{\Delta} T \eta, \quad (97)$$

а его решением будет:

$$\eta = \sum_n \lambda_{\Delta}^n (D\hat{T})^n D\hat{\rho}. \quad (98)$$

Следовательно, эффективный нуклон-нуклонный гамильтониан (94) может быть записан в виде

$$H_{\text{int}} = \lambda_N \sum_{n, h} \lambda_{\Delta}^{n+h} \hat{\rho} (D\hat{T})^{n+h} D\hat{\rho}. \quad (99)$$

Для вычисления вклада H_{int} в энергию основного состояния системы используем (94). В обозначениях (96) будет иметь:

$$\delta E_{\text{int}} = \frac{\lambda_N}{2\lambda_{\Delta}} \int_0^{\lambda_{\Delta}} \langle \eta D^{-1} \eta \rangle d\lambda_{\Delta}. \quad (100)$$

Взяв производную от обеих частей (97), с помощью цепочки равенства:

$$\begin{aligned} \eta D^{-1} \eta &= \rho \eta + \lambda_0 \eta T \eta = \rho \eta + \lambda_{\Delta} \eta D^{-1} (1 + \lambda_{\Delta} D T) \frac{\partial \eta}{\partial \lambda_{\Delta}} = \\ &= \rho \eta + \lambda_{\Delta} \eta (D^{-1} + \lambda_{\Delta} T) \frac{\partial \eta}{\partial \lambda_{\Delta}} = \rho \eta + \lambda_{\Delta} \rho \frac{\partial \eta}{\partial \lambda_{\Delta}} = \rho \frac{\partial}{\partial \lambda_{\Delta}} (\lambda_{\Delta} \eta) \end{aligned} \quad (101)$$

получаем

$$\delta E_{\text{int}} = (1/2) \lambda_N \langle \rho \eta \rangle, \quad (102)$$

где η определено выражением (98).

Вспомним теперь, что разность масс $(M_{\Delta} - M_N) \sim 300$ МэВ, а $\varepsilon_F^p \sim 40$ МэВ. Поэтому при вычислении ядерных вкладов зависимостью G_{Δ} от p и ε можно в первом приближении пренебречь, полагая $G_{\Delta}(p, \varepsilon) = G_{\Delta} = -1/(M_{\Delta} - M_N)$. Тогда $\hat{T} = 2G_{\Delta}\hat{\rho}$ и вклад в энергию дается следующим рядом:

$$\begin{aligned} \delta E_{\text{int}} &= \frac{1}{2} g_{NN}^2 \left\langle \hat{\rho} \sum_n (g_{N\Delta}^2)^n D (2G_{\Delta}\hat{\rho}) D \dots (2G_{\Delta}\hat{\rho}) \dots D\hat{\rho} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} g_{NN}^2 \sum_n (2g_{N\Delta}^2 G_{\Delta})^n D^n \langle \rho \dots \rho \dots \rho \rangle. \end{aligned} \quad (103)$$

Полученное соотношение остается справедливым и при учете псевдоскалярности пиона.

Перегруппировывая члены в ряде, дающем δE_{int} , получаем

$$\delta E_{\text{int}} = \frac{1}{2} \frac{g_{NN}^2}{g_{N\Delta}^2} \int \int \sum_{n=2}^{\infty} \chi^{(n)}(q_1 \dots q_n) \prod_i (2G\Delta g_{N\Delta}^2 D(q_i)) \times \\ \times \{1 + 2G\Delta \rho g_{N\Delta}^2 D(q_1) + \\ + 2G_{\Delta} g_{N\Delta}^2 D(q_i) 2G_{\Delta} g_{N\Delta}^2 D(q_k) \chi(q, q_n)\} dq_1 \dots dq_n. \quad (104)$$

Ряд в фигурных скобках можно интерпретировать в терминах фейнмановских диаграмм (рис. 4).

Собирая все приводимые диаграммы, мы получаем вместо голой перенормированную D -функцию пиона. Подчеркнем, что в перенор-

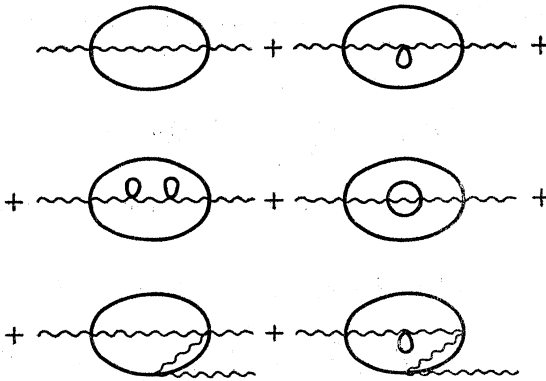


Рис. 4. Простейшие вклады в пионный поляризационный оператор

мировку здесь входят только диаграммы перехода $\pi \rightarrow \Delta + \bar{N}$ и не входят диаграммы $\pi \rightarrow N + \bar{N}$, уже включенные в соответствующие функции отклика $\chi^{(n)}$. В итоге будем иметь

$$\delta E_{\text{int}} = \frac{1}{2} \left(\frac{g_{NN}}{g_{N\Delta}} \right)^2 - \\ - \frac{1}{2G_{\Delta}} \sum_{n=2}^{\infty} \int dq_1 \dots dq_{n-1} \chi^{(n)}(q_1 \dots q_{n-1}) \prod_{i=1}^{n-1} \tilde{D}(q_i), \quad (105)$$

где $\tilde{D} = \frac{2G_{\Delta} g_{N\Delta}^2 D}{1 + 2G_{\Delta} \rho + \dots}$.

Заметим теперь, что в этом разделе мы никак не отделяли эффектов, связанных с наличием ядерной среды, от вакуумных. Поэтому (105) содержит все расходимости, присущие стандартной квантовой теории поля — скажем, в первом же члене (105) стоит интеграл от произведения GG , содержащий не зависящую от плотности среды

ультрафиолетовую расходимость, связанную с перенормировкой массы нуклона мезонным полем. Рецепты исключения этих расходимостей те же, что и в квантовой теории поля. Расчеты δE_{int} по формуле (105) сейчас проводятся.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложен непертурбативный подход к вычислению основных характеристик ферми-систем через потенциал пустотного взаимодействия частиц. Мы написали точную систему зацепляющихся уравнений для зависящего от частоты эффективного взаимодействия между квазичастицами в среде. В отличие от ястровского корреляционного, кластерного подходов и т. п., в которых обычно вводится феноменологическая корреляционная двухчастичная функция, а ее параметры определяются вариационным путем, в данном подходе подобная процедура отсутствует вовсе. И в этом плане он — «родственник» подходов, развиваемых в теории твердого тела.

Из системы точных зацепляющихся уравнений мы получили приближенные, но существенно более простые уравнения. При выводе этих уравнений, которые, как было продемонстрировано, можно использовать практически, был сделан ряд упрощений, точность которых во многом предстоит еще установить. И первоочередная задача в этом направлении — сравнение на моделях численных результатов этого подхода с результатами соответствующих монтекарловских расчетов — отчасти выполнена. Проведенное сравнение для двух систем — электронной жидкости и нейтронной материи — свидетельствует о хорошей работоспособности метода. К сожалению, испытать таким же образом цепочку уравнений (или хотя бы пару уравнений) пока не представляется возможным из-за ограничений по вычислительной технике. Хотя система даже из двух уравнений позволяет получить значительно больше информации — это, во-первых, нелинейный отклик, с которым связан двойной β -распад, микроскопические расчеты среднего поля, несохраняющего четность, и т. п., во-вторых, функция линейного отклика, также получающаяся в этом расчете, дала бы возможность проанализировать резонансы системы, в частности их ширины.

Если предлагаемый подход «выживет», то можно будет заняться дальнейшими исследованиями в области конечных температур, обобщением его для описания сверхтекучих систем, и в частности для вычисления щели Δ через пустотные силы. Возможно, предлагаемый метод удастся обобщить на бозе-системы. В ядерной физике, помимо основных проблем — 1) определения констант теории конечных ферми-систем, 2) микроскопического вычисления уравнения состояния ядерного вещества, — есть несколько задач, для решения которых этот метод мог бы пригодиться: вычисления P -нечетной компоненты NN -взаимодействия в ядре, параметров самосогласованного ядерного потенциала, действующего на Λ - и Σ -частицы в ядре, расчет

уравнения состояния нейтронной материи и изучение ядер, удаленных от полосы стабильности.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность М. Я. Амусье, А. М. Братковскому, В. Н. Ефимову, Н. Е. Зейну, Э. Е. Саперштейну, С. В. Толоконникову и С. А. Фаянсу за плодотворное обсуждение затронутых проблем.

ПРИЛОЖЕНИЕ А!

Здесь мы введем соотношение (4), связывающее изменение δE_0 внутренней энергии системы в слабом внешнем поле $\delta V_0(\mathbf{r}, t)$ с функцией линейного отклика χ . Будем действовать тем же методом, которым выводится лемановское разложение для χ [14]. Запишем возмущенную Ψ -функцию основного состояния

$$\Psi(t) = \sum a_n(t) e^{-iE_n t} |n\rangle \quad (\text{A.1})$$

с граничным условием $a_n(t \rightarrow \infty) = \delta_{n0}$. Здесь $|n\rangle$ — точное n -состояние системы: В первом порядке по внешнему полю $\delta V_0 \sim e^{i\omega t - \eta t}$:

$$a_n(t) = \frac{(\rho_{\mathbf{k}}^{\dagger})_{n0} \delta V_0(\mathbf{k}, \omega)}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} e^{-i(\omega - \omega_{n0})t} - \frac{(\rho_{\mathbf{k}})_{n0} \delta V_0^*(\mathbf{k}, \omega)}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} e^{i(\omega + \omega_{n0})t}, \quad (\text{A.2})$$

где $\omega_{n0} = E_n - E_0$; $\rho_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \sum a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}$, $\eta \rightarrow 0$.

Подставляя (A.2) в формулу для ρ и переходя к фурье-компоненте по времени, приходим к лемановскому разложению для функции отклика

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = \sum |(\rho_{\mathbf{k}})_{n0}|^2 \left[\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right], \quad (\text{A.3})$$

причем мнимая часть χ — ее обычно называют динамическим формфактором и обозначают S — представляется выражением

$$S(\mathbf{k}, \omega) = -\text{Im} \chi(\mathbf{k}, \omega) = \sum |\rho_{\mathbf{k}}^{\dagger}|_{\delta_0}^2 \delta(\omega - \omega_{s0}). \quad (\text{A.4})$$

Отсюда следует

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = \int_0^{\infty} d\omega_1 S(\mathbf{k}, \omega_1) \left[\frac{1}{\omega - \omega_1 + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_1 + i\eta} \right], \quad (\text{A.5})$$

или, иначе,

$$\text{Re} \chi(\mathbf{k}, \omega) = P \int_0^{\infty} S(\mathbf{k}, \omega_1) \frac{2\omega_1}{\omega_1^2 - \omega^2} d\omega_1. \quad (\text{A.6})$$

Полагая здесь $\omega = k = 0$ и учитывая связь (12) $\chi(0)$ со сжимаемостью системы: $\chi(0) = -\rho/k$, находим

$$\int S(0, \omega_1) \frac{d\omega_1}{\omega_1} = \frac{\rho}{2K}. \quad (\text{A.7})$$

Это и есть правило суммы для сжимаемости [14]. Отметим, что деленный на интеграл по частотам от $S(k, \omega)$ называется статическим формфактором $S(k)$. Как следует из (A.4):

$$S(\mathbf{k}) = (0 | \rho_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rho_{\mathbf{k}} | 0) = \frac{1}{\rho} \int_0^{\infty} d\omega S(\mathbf{k}, \omega). \quad (\text{A.8})$$

Из определения статического формфактора видно, что он напрямую связан со средним значением оператора потенциальной энергии $H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum \mathcal{V}^{\circ}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}_1+\mathbf{k}}$. Переставляя здесь операторы a и a^{\dagger} с тем, чтобы выразить H_{int} через $\rho_{\mathbf{k}}$ и $\rho_{\mathbf{k}}^{\dagger}$, находим

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{V}^{\circ}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rho_{\mathbf{k}} - \rho \mathcal{V}^{\circ}(0), \quad (\text{A.9})$$

и, таким образом,

$$\langle H_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2\rho} \int (S(\mathbf{k}) - 1) \mathcal{V}^{\circ}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (\text{A.10})$$

Среднее $\langle H_{\text{int}} \rangle$ с помощью (A.8) и (A.4) связывается с мнимой частью функции отклика χ , и теперь с помощью хорошо известной из статической физики формулы Фейнмана — Хеллмана

$$g \frac{\partial E}{\partial g} = \langle H_{\text{int}} \rangle \quad (\text{A.11})$$

легко получить для энергии ε на одну частицу:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \frac{1}{2\rho} \int \int \mathcal{V}^{\circ}(\mathbf{k}) [\text{Im} \chi(\mathbf{k}, \omega) + 2\pi\delta(\omega)] \frac{d^4(k)}{(2\pi)^4}, \quad (\text{A.12})$$

$\varepsilon_0 = \frac{3}{5} \varepsilon_{\text{F}}^0$ — кинетическая энергия системы в пересчете на одну частицу. Интеграл по вещественной оси ω можно заменить интегралом по мнимой, где функция χ вещественна (см. подробности в [14]), и в результате получится формула (1).

Рассчитаем теперь среднее от гамильтониана системы $(\Psi_0(t) | H | \Psi_0(t))$, учтя и изменение коэффициента $a_0(t)$ во втором порядке теории возмущений. Тогда

$$\delta^2 E_0 = (\Psi_0 | H | \Psi_0) - E_0 = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\langle \rho_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle_{0s}|^2 \delta V_0(\mathbf{k}, \omega) \delta V_0^*(\mathbf{k}, \omega)}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{\mathbf{k}0}^2}. \quad (\text{A.13})$$

Сравнивая (A.3) с (A.13), окончательно получаем

$$\delta^2 E_0 = - \frac{1}{2} \delta V_0(\mathbf{k}, \omega) \chi(\mathbf{k}, \omega) \delta V_0^*(\mathbf{k}, \omega). \quad (\text{A.14})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

В этом приложении мы получим систему зацепляющихся уравнений для эффективного потенциала $R(k, \omega)$ и его функциональных производных. Начнем с точного уравнения (10):

$$R(k) = \mathcal{V}^{\circ}(k) - \frac{1}{2} \frac{\delta^2}{\delta \rho(k) \delta \rho(k)} \int \mathcal{V}^{\circ}(q) \chi(q) \frac{dg}{g} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4}. \quad (\text{B.1})$$

Чтобы вычислить функциональные производные χ , запишем систему вариационных соотношений, выводимых прямо из определения функций χ и κ [см. соотношения (7) и (8)]. Мы имеем:

$$\begin{aligned} \delta \chi &= \kappa \delta \chi_0 \kappa + \chi \delta R \chi; \\ \delta \kappa &= \kappa \delta R \chi + T \delta \chi_0 \kappa; \\ \delta T &= T \delta \chi_0 T + \kappa \delta R \kappa, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

где введена амплитуда рассеяния T , подчиняющаяся уравнению

$$T = R + R \chi_0 T, \quad (\text{B.3})$$

решение которого в компактном виде таково: $T = R\kappa = R/(1 - R_0\chi)$.
На основе (В.2) нетрудно вычислить и вторую вариацию χ :

$$\delta^2\chi = \kappa\delta^2\chi_0\kappa + 2\kappa\delta\chi_0 T\delta\chi_0\kappa + 2\kappa\delta\chi_0\delta R\chi + 2\chi\delta R\kappa\delta X_0\kappa + 2\chi\delta R\chi\delta R\chi + \chi\delta^2 R\chi. \quad (\text{В.4})$$

После подстановки этих соотношений в (В.1) получается приведенное в основном тексте обзора уравнение для эффективного потенциала R :

$$R(k) = \mathcal{V}^\circ(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \iint \mathcal{V}^\circ(\mathbf{q}) [\kappa(q) I^2(q, k) \kappa(q) + 2\kappa(q) I^1(q, k) T(q+k) \times \\ \times I^1(q, k) \kappa(q) + 2\kappa(q) I^1(q, k) \kappa(q+k) O^1(q, k) \chi(q) + 2\chi(q) O^1(q, k) \times \\ \times \kappa(q+k) I^1(q, k) \kappa(q) + 2\chi(q) O^1(q, k) \chi(q+k) O^1(q, k) \chi(q) + \\ + \chi(q) O^2(q, k) \chi(q)] \frac{d^4q dg}{(2\pi)^4 g}. \quad (\text{В.5})$$

Здесь введены обозначения:

$$I^1(q, k) = \frac{\delta\chi(q)}{\delta\rho(k)}; \quad I^2(q, d) = \frac{\delta^2\chi(q)}{\delta\rho(k)\delta\rho(-k)}; \\ O^1(q, k) = \frac{\delta R(q)}{\delta\rho(k)}; \quad O^2(q, k) = \frac{\delta^2 R}{\delta\rho(k)\delta\rho(-k)}. \quad (\text{В.6})$$

Двойка перед всеми слагаемыми в (В.5), кроме первого и последнего, возникла в результате суммы по перестановке импульсов k и $-k$.

Таким образом, эффективный потенциал парного взаимодействия частиц R выражается через блоки эффективного трех- и четырехчастичного взаимодействий O^1 и O^2 . Можно вывести уравнения и для этих блоков, если проварьировать (В.4) еще дважды, но при этом появятся новые вариационные производные O^3 , O^4 и т. д. В итоге возникает бесконечная последовательность интегральных уравнений для эффективных амплитуд многоквaziчастичных взаимодействий. Любое из уравнений этой системы содержит всего одно интегрирование по промежуточному 4-импульсу q , а вместо громоздких точных функций Грина со сложными аналитическими свойствами в них входят относительно простые функции распространения свободных частиц, движущихся в самосогласованном поле $U = \delta W/\delta\rho$.

С ростом числа вариационных дифференцирований число членов в уравнениях быстро растет, и, чтобы уменьшить громоздкость получаемых выражений, полезно ввести символическую запись. Обозначим I^i i -ю вариационную производную χ_0 , а соответствующую вариационную производную R через O^i . Нетрудно видеть, что в правой части уравнения для блока R возникает сумма разнообразных произведений, содержащих блоки I^l и O^n ($l+n \leq i+2$), причем: 1) между двумя любыми блоками I^i и I^j всегда стоит амплитуда T ; 2) между двумя любыми блоками I^i и O^j всегда стоит эффективное поле κ , а между O^i и O^j — функция отклика χ ; 3) если слагаемое начинается с «буквы» κ , за ней идет блок I , если с «буквы» χ , то за ней стоит блок O . Оно кончается «буквой» κ , если перед ней стоит блок I , или буквой χ , если блок O (тривиальное следствие требования эрмитовости результата); 4) берется сумма по всем неидентичным перестановкам блоков O , I верхних индексов i, j и входных импульсов k_i ; 5) аргумент стоящего под знаком интеграла потенциала \mathcal{V}° всегда равен текущему 4-импульсу q , в функциях T , κ и χ , входящих в подынтегральное выражение, он сдвигается. Этот сдвиг определяется поглощенным к этому моменту 4-импульсом, т. е. суммой всех аргументов в плотностях $\rho(k_i)$, по которым идет вариация в блоках O и I , стоящих перед рассматриваемым блоком [сумма аргументов всех плотностей $\rho(k_i)$, входящих в вариационную производную $\frac{\delta^2 W}{\delta\rho(k_1)\delta\rho(k_2)\dots\delta\rho(k_n)}$, должна быть нулем в силу одно-

родности системы в пространстве и времени, т. е. $\sum_1^n k_i = 0$]; б) осуществляется

интегрирование по единственному текущему импульсу q и по константе связи g . Руководствуясь этими правилами, легко выписать в символической форме уравнение для вариационной производной

$$O^1(k_1, k_2) = -\frac{\delta R(k_1)}{\delta p(k_2)} = \frac{\delta^3 W}{\delta p(k_1) \delta p(k_2) \delta p(-k_1 - k_2)}.$$

Будем обозначать скобками суммирование и интегрирование по всем промежуточным переменным и перестановкам импульсов. Тогда

$$\begin{aligned} O^1 = & -\frac{1}{2} (\mathcal{V}^0 [\kappa I^1 T I^1 T \kappa + \kappa I^1 T I^1 \kappa O^1 \chi + \kappa I^1 \kappa O^1 \kappa I^1 \kappa + \chi O^1 \kappa I^1 T I^1 \kappa + \\ & + \kappa I^1 \kappa O^1 \chi O^1 \chi + \chi O^1 \kappa I^1 \kappa O^1 \chi + \chi O^1 \chi O^1 \kappa I^1 \kappa + \chi O^1 \chi O^1 \chi O^1 \chi + \kappa I^1 T I^2 \kappa + \\ & + \kappa I^2 T I^1 \kappa + \kappa I^1 \kappa O^2 \chi + \chi O^2 \kappa I^1 \kappa + \chi O^1 \kappa I^2 \kappa + \kappa I^2 \kappa O^1 \chi + \chi O^1 \chi O^2 \chi + \\ & + \chi O^2 \chi O^1 \chi + \kappa I^3 \kappa + \chi O^3 \chi]). \end{aligned} \quad (B.7)$$

Запись следующих уравнений для O^2, O^3 и т. д. можно еще упростить, если не выписывать явно функции χ, κ, T и \mathcal{V}^0 , подразумевая, что они всегда стоят при соответствующих блоках I и O . Тогда (B.7) можно записать совсем кратко в виде суммы нулей и единиц:

$$O^1 = (1^1 1^1 1^1 + 1^1 1^1 0^1 + 1^1 0^1 0^1 + 0^1 0^1 0^1 + 1^2 1^1 + 1^2 0^1 + 0^2 1^1 + 0^2 0^1 + 1^3 + 0^3). \quad (B.8)$$

Блоку I^n сопоставляется здесь символ 1^n , блоку O^n — символ 0^n . Соответствующая запись для O^2 такова:

$$\begin{aligned} O^2 \rightarrow & (1^1 1^1 1^1 1^1 + 1^1 1^1 1^1 0^1 + 1^1 1^1 0^1 0^1 + 1^1 0^1 0^1 0^1 + 0^1 0^1 0^1 0^1 + 1^2 1^1 1^1 + 1^2 1^1 0^1 + \\ & + 1^2 0^1 0^1 + 1^2 1^2 + 1^1 0^2 + 0^2 1^1 1^1 + 0^2 1^1 0^1 + 0^2 0^1 0^1 + 0^2 0^2 + 1^3 + 1^3 0^1 + \\ & + 0^3 1^1 + 0^3 0^1 + 1^4 + 0^4). \end{aligned} \quad (B.9)$$

Чтобы вернуться отсюда к нормальной записи, надо, как уже говорилось, вставить в (B.9) в нужном порядке блоки $\mathcal{V}^0, \kappa, \chi$ и T с теми аргументами, которые возникают в результате вариационной процедуры, осуществить все необходимые перестановки «нулей» и «единиц», а также входных импульсов и, наконец, проинтегрировать получившееся выражение по константе связи и единственному 4-импульсу q . Действуя в том же духе, можно вывести уравнение для любого блока O^n . Одно из заметных преимуществ полученной системы, эквивалентной точной системы уравнений кластерных теорий, в том, что мы можем записать в символическом виде любое из уравнений системы, не выписывая предыдущих:

$$O^n \rightarrow \sum (1^{h_1})^{\alpha_1} (1^{h_2})^{\alpha_2} (1^{h_m})^{\alpha_m} (0^{l_1})^{\beta_1} (0^{l_2})^{\beta_2} \dots (0^{l_n})^{\beta_n}. \quad (B.10)$$

Здесь $k_1 < k_2 < \dots < k_m$ — целые положительные числа, так же как и $\alpha_i \beta_n$, и $l_1 < l_2 < \dots < l_n$; $(1^{h_1})^{\alpha_1} = \underbrace{1^{h_1} 1^{h_1} \dots 1^{h_1}}_{\alpha_1 \text{ раз}}$. Эти числа произвольные, они

связаны одним условием

$$k_1 \alpha_1 + k_2 \alpha_2 + \dots + k_m \alpha_m + l_1 \beta_1 + l_2 \beta_2 \dots + l_n \beta_n = i + 2. \quad (B.11)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Для решения полученной системы уравнений для эффективного потенциала R и его функциональных производных нужны блоки $I^n = \frac{\delta^n \chi_0}{\delta p(1) \dots \delta p(n)}$.

Их можно вычислять последовательно — сначала I^1 , потом I^2 и т. д.:

$$I^1(q, k) = \frac{\delta\chi_0(p)}{\delta\rho(k)} = \int \left[\frac{\delta G_0(p)}{\delta\rho(k)} G_0(p+q) + G_0^*(p) \frac{\delta G_0(p+q)}{\delta\rho(k)} \right] \frac{d^4p}{(2\pi)^4}. \quad (C.1)$$

Как и всюду в статье, знак интеграла включает в себя и операцию суммирования по спинам. Вариационная производная $\delta G_0/\delta\rho$ складается из двух членов. Один связан с тем обстоятельством, что при вариации ρ с волновым вектором k система перестает быть однородной, и даже функция распространения взаимодействующих частиц меняется. Этот вклад можно рассчитать так. При наложении внешнего поля δV_0 изменение функции Грина взаимодействующих частиц равно: $\delta G_0 = G_0 \delta V_0 G_0$. Отсюда, деля на $\delta\rho(k)$, находим:

$$\frac{\delta_1 G_0(p)}{\delta\rho(k)} = G_0^*(p) G_0(p+k) \chi^{-1}(k). \quad (C.2)$$

Другой вклад в вариационную производную G_0 обязан изменению самосогласованного поля U_0 : $\delta U_0 = R \delta\rho$ и

$$\frac{\delta_2 G_0(p)}{\delta\rho(k)} = G_0(p) G_0(p+k) R(k). \quad (C.3)$$

Складывая (C.2) и (C.3) и используя (6), получаем

$$\frac{\delta G_0(p)}{\delta\rho(k)} = G_0(p) G_0(p+k) \chi_0^{-1}(k). \quad (C.4)$$

Подставляя эту формулу в (C.1), окончательно находим

$$I^1(q, k) = \chi_0^{-1}(k) I_1(q, k), \quad (C.5)$$

где $I_1(q, k) = \frac{\delta\chi_0(q)}{\delta V_0(k)}$. В развернутом виде

$$I_1(q, k) = \int [G_0^*(p)G_0(p+k)G_0(p+q+k) + G_0(p)G_0(p+q)G_0(p+k+q)] \frac{d^4p}{(2\pi)^4}. \quad (C.6)$$

Блок I_1 уже симметричен относительно перестановок всех импульсов, ибо представляет собой третью вариационную производную энергии по внешним полям.

Следующая вариационная производная

$$I^2(q, k_1, k_2) = \delta I^1(q, k_1)/\delta\rho(k_2) \quad (C.7)$$

вычисляется повторным дифференцированием (C.1):

$$I^2(k_1, q, k_2) = \chi_0^{-1}(k_1) I_2(k_1, q, k_2) \chi_0^{-1}(k_2) - \chi_0^{-1}(k_1) I_1(q, k_1+k_2) \chi_0^{-1}(k_1+k_2) I_1(k_1+k_2, q) \chi_0^{-1}(k_2), \quad (C.8)$$

где

$$I_2(k_1, q, k_2) = \int [G_0(p)G_0(p+q)G_0(p+q+k_1)G_0(p+q+k_1+k_2) + G_0(p)G_0(p+k_1)G_0(p+k_1+k_2)G_0(p-q) + G_0(p)G_0(p+k_1)G_0(p-q-k_2)G_0(p-q) + G_0(p)G_0(p+k_2)G_0(p-q-k_1)G_0(p-q) + G_0(p)G_0(p-q-k_1-k_2)G_0(p-q-k_1)G_0(p-q) + G_0(p)G_0(p-q-k_1-k_2)G_0(p-q-k_2)G_0(p-q)] \frac{d^4p}{(2\pi)^4}. \quad (C.9)$$

В качестве иллюстрации вычислим разными способами эффективный хартри-фоковский потенциал $R_{\text{HF}}(k)$. По определению, в приближении Хартри — Фока

$$\chi_{\text{HF}}(k) = \chi_0(k) + \chi_0(k) R_{\text{HF}}(k) \chi_0(k). \quad (\text{C.10})$$

С другой стороны, хартри-фоковскую функцию отклика $\chi_{\text{HF}}(k)$ можно вычислить в лоб, пользуясь формулами квантовомеханической теории возмущений

$$\begin{aligned} \chi_{\text{HF}}(k) = & \int G_0(p) \mathcal{F}_{\text{HF}}(k) G_0(p+k) \frac{d^4 p}{(2\pi)^4 i} + \\ & + \int [(G_{\text{HF}}(p) - G_0(p)) G_0(p+k) + G_0(p) G_{\text{HF}}(p+k) - G_0(p)] \frac{d^4 p}{(2\pi)^4 i}. \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Хартри-фоковская вершинная часть \mathcal{F}_{HF} определяется интегралом

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{HF}}(k) = & 1 + \int G(p) \mathcal{V}^\circ(k) G(p+k) \frac{d^4 p}{(2\pi)^4 i} - \\ & - \int \int G(p) \mathcal{V}^\circ(p-p_1) G(p_1+k) \frac{d^4 p_1 d^4 p_2}{(2\pi)^8}, \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

а хартри-фоковская функция Грина такова:

$$G_{\text{HF}}(p) = [\varepsilon - \varepsilon_p^0 - \Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{p})]^{-1},$$

где

$$\Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{p}) = - \int \mathcal{V}^\circ(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) G_0(p_1) \frac{d^4 p_1}{(2\pi)^4}. \quad (\text{C.13})$$

Подставляя полученные результаты в (C.11) и сравнивая с (C.10), находим

$$\begin{aligned} R_{\text{HF}}(k) = & \mathcal{V}^\circ(k) - \int \chi_0(\mathbf{p}, k) \mathcal{V}^\circ(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \chi_0(\mathbf{p}_1, k) \frac{d^3 p_1 d^3 p_2}{(2\pi)^6} - \\ & - \int G_0(p) G_0(p) G_0(p+k) \mathcal{V}^\circ(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) G_0(p_1) \frac{d^4 p d^4 p_1}{(2\pi)^8}, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

где $\chi_0(\mathbf{p}, k) = \frac{n_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} - n_{\mathbf{p}}}{\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 - \omega}$.

Эту же формулу можно получить и иначе, варьируя дважды хартри-фоковскую энергию E_{HF} по ρ и используя формулу (C.5) для производной $\frac{\delta^2 \chi}{\delta \rho \delta \rho}$:

$$\begin{aligned} R_{\text{HF}}(k) = & \mathcal{V}^\circ(k) - \frac{1}{2} \int \mathcal{V}^\circ(q) \left\{ \chi_0^{-2}(k) I_2(q, k) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \chi_0^{-2}(k) \chi_0^{-1}(0) I_1(0, k) I_1(q, k) \right\} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4 i}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Подставляя сюда (C.6) и (C.9), мы после простых преобразований снова приходим к соотношению (C.14).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Clark J. W. Lectures Notes in Physics. 1981. Vol. 138. P. 184—212.
2. Panharipande V. A., Wiringa R. B. // Rev. Mod. Phys. 1979. Vol. 51. P. 821—840.
3. Coester F. // Nucl. Phys. 1958. Vol. 7. P. 421—440.
4. Coester F., Kümmel H. // Nucl. Phys. 1960. Vol. 17. P. 477—490.

5. Kümmel H., Lümmann K., Zabolitsky J. G. // Phys. Repts. 1978. Vol. 360. P. 1—80.
6. Monte-Carlo Methods in Statistical Physics/Ed. by A. Binder. N. Y.: Springer Verlag, 1979.
7. Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. 1965. Vol. 136B. P. 864—876.
8. Kohn W., Sham L. // Phys. Rev. 1965. Vol. 140A. P. 1133—1145.
9. Ландау Л. Д. // ЖЭТФ. 1956. Т. 30. С. 1058—1065.
10. Ландау Л. Д. // ЖЭТФ. 1958. Т. 35. С. 97—105.
11. Мигдал А. Б. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. М.: Наука, 1983.
12. Шагинян В. Р. Препринт ЛИЯФ № 973. Гатчина, 1984.
13. Артомонов С. А., Оглоблин С. Г., Шагинян В. Р. // ЯФ. 1987. Т. 46. С. 1651—1663.
14. Нозьер Ф., Пайнс Д. Теория квантовых жидкостей: Пер. с англ. М.: Мир, 1967.
15. Ходель В. П., Шагинян В. Р. // ЯФ. 1987. Т. 46. С. 1638—1650.
16. Ходель В. А., Шагинян В. Р. Препринт ЛИЯФ № 1181. Гатчина, 1986.
17. Kavazoe Y., Yasuhara H., Vatabe M. // J. Phys. 1977. Vol. 16A. P. 1258—1270.
18. Ceperley D., Alder B. // Phys. Rev. Lett. 1980. Vol. 45. P. 566—572.
19. Ceperley D., Chester G. V., Kalos M. H. // Phys. Rev. 1981. Vol. B16. P. 3081—3095.
20. Zabolitsky J. G. // Phys. Rev. 1977. Vol. A16. P. 1258—1272.
21. Bishop R. F., Lümmann K. H. // Phys. Rev. 1981. Vol. B26. P. 5523—5531.
22. Lantto L. J., Siemens P. // Nucl. Phys. 1979. Vol. A317. P. 55—70.
23. Галицкий В. М. Избранные труды. М.: Наука, 1983.
24. Gell-Mann M. // Phys. Rev. 1957. Vol. 106. P. 369—381.
25. Ходель В. В. Препринт ЛИЯФ № 121. Гатчина, 1990.
26. Ахизер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М.: Физматгиз, 1959.
27. Khodel V. A., Shaginyan V. R. // Nucl. Phys. 1989. Vol. 500. P. 242—254.
28. Мигдал А. Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. М.: Наука, 1978.
29. Дюгаев М. А. // Письма в ЖЭТФ. 1975. Т. 22. С. 181—185.
30. Ходель В. А., Шагинян В. Р. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. С. 44—48.
31. Shlomo S. // Rep. Progr. Phys. 1978. Vol. 41. P. 626—641.
32. Vautherin D., Brink D. // Phys. Rev. 1972. Vol. C5. P. 626—641.
33. Шагинян В. Р. // ЯФ. 1984. Т. 40. С. 1144—1154.
34. Ходель В. А., Шагинян В. Р. // ЯФ. 1989. Т. 50. С. 297—305.