

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Λ 641

P17-87-635

А.А.Литвин, В.Б.Приезжев

ЭФФЕКТИВНЫЙ ПАРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ  
В РЕШЕТОЧНОМ ФЕРМИ-ГАЗЕ

Направлено в "J.Stat.Phys."

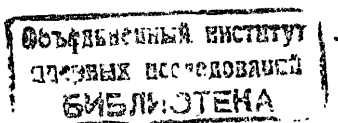
1987

## I. ВВЕДЕНИЕ

В недавней работе Кеннеди и Либа<sup>/1/</sup> была предложена модификация модели Хаббарда<sup>/2/</sup>, названная статической моделью. Эта квантово-механическая модель в упрощенной форме описывает эффекты корреляции электронов в твердых телах. Упрощающее предположение относится к подвижности электронов с противоположными направлениями спина: электронам со спином "вверх" приписывается бесконечно большая масса, так что их подвижность оказывается бесконечно малой по сравнению с электронами, имеющими спин "вниз". В результате возникает система фермионов одного сорта (бесспиновых электронов), взаимодействующих с массивными центрами (ионами). Задача состоит в определении расположения ионов, обеспечивающего минимум энергии основного состояния, а также в выяснении термодинамической устойчивости такого расположения.

В работе<sup>/1/</sup> эта задача решена для случая, когда число электронов  $N_e$  равно числу ионов  $N_i$ , а их сумма  $N_e + N_i$  равна числу узлов решетки. Теорема, доказанная Кеннеди и Либом, утверждает, что в этом случае при низких температурах ионы располагаются в "шахматном" порядке, то есть для любой пары ближайших соседей на решетке один узел занят ионом, а другой нет. При достаточно высоких температурах упорядочение исчезает.

Положения ионов определяются сложным эффективным взаимодействием между ними, возникающим за счет влияния электронной среды. Для дальнейшего выяснения свойств статической модели нужно определить поведение эффективного взаимодействия при различных значениях плотности электронов в зависимости от температуры. Разумеется, в общей постановке эта задача очень сложна. Нашей целью в данной работе является детальное изучение парного ион-ионного взаимодействия, которое позволяет сделать некоторые заключения о поведении статической модели при низкой и высокой плотности электронов. Проблема вычисления парного потенциала в статической модели аналогична проблеме косвенного взаимодействия в кристалле<sup>/3/</sup>. Основное внимание в этой задаче уделяется экранированию кулоновского взаимодействия, которое приводит к потенциалу типа Линд-



харда<sup>/4/</sup>. нас будет интересовать исключительно решеточный аспект этой задачи, и в особенности значения потенциала для ближайших и следующих за ближайшими соседями решетки.

Из-за отсутствия кулоновского взаимодействия между электронами задача о парном потенциале сводится к вычислению свободной энергии идеального ферми-газа, взаимодействующего с двумя центрами, фиксированными в точках  $r_1$  и  $r_2$ . Основной особенностью модели является прыжковый характер кинетической энергии электронов. Поэтому вместо решения квантовой задачи на  $d$ -мерной решетке удобно перейти к эквивалентной  $(d+1)$ -мерной классической задаче, сформулировав ее в терминах случайных блужданий. Воспользовавшись формулой Троттера, в п.2 мы получим статистическую сумму модели как сумму по классическим траекториям электронов. Отсутствие взаимодействия между электронами позволяет выразить свободную энергию системы через характеристики случайного блуждания единственной частицы. В п.3 потенциал эффективного ион-ионного взаимодействия  $V(r_1, r_2)$  выражен через производящую функцию первого достижения точки  $r_2$  из точки  $r_1$ , хорошо известную в теории случайных блужданий. В п.4 приведены численные расчеты полученного потенциала для двумерного случая.

Найденный потенциал обнаруживает фриделевские осцилляции<sup>/5/</sup>, связанные с осцилляцией плотности электронов в окрестности иона. Важной особенностью потенциала является то, что его значения для ближайших соседей всегда превосходят значения для узлов, расположенных по диагонали элементарной ячейки при всех значениях плотности электронов. Этот результат позволяет предположить, что структура, обнаруженная Кеннеди и Либом<sup>/1/</sup> при фиксированной плотности электронов, сохраняется при произвольной плотности. Кроме того, осциллирующий характер потенциала допускает существование других периодических структур, в которых на каждый узел, занятый ионом, приходится несколько свободных узлов.

## 2. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ И ЭКВИВАЛЕНТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Отправной точкой для формулировки статической модели является гамильтониан модели Хаббарда. Пусть  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$  -  $d$ -мерная решетка и  $a_{r\sigma}^+$ ,  $a_{r\sigma}$  - операторы рождения и уничтожения электронов со спином  $\sigma = \uparrow$  или  $\sigma = \downarrow$  в точке  $r \in \Lambda$ . В этих обозначениях гамильтониан Хаббарда имеет вид

$$H = \sum_{\sigma} \sum_{r, r' \in \Lambda} t_{rr'} a_{r\sigma}^+ a_{r'\sigma} + \sum_{r \in \Lambda} n_{r\uparrow} n_{r\downarrow} - \sum_{\sigma} \sum_{r \in \Lambda} \mu_{\sigma} n_{r\sigma}, \quad (1)$$

где  $n_{r\sigma} = a_{r\sigma}^+ a_{r\sigma}$ . Обычно предполагается, что элементы матрицы  $t_{rr'}$  отличны от нуля, если точки  $r$  и  $r'$  - ближайшие соседи и равны нулю в остальных случаях. Параметр  $U$  определяет взаимодействие электронов с различными спинами в одном узле. Химический потенциал  $\mu_{\sigma}$  регулирует плотность электронов со спином  $\sigma$ .

Статическая модель получается из модели Хаббарда, если предположить, что электроны со спином  $\sigma = \uparrow$  неподвижны. Это означает, что в первой сумме в (1) опускается член с  $\sigma = \uparrow$ . Далее вводится функция  $W(r)$ , принимающая значения 1 или 0 в зависимости от того, занята или нет точка  $r$  электроном со спином  $\uparrow$ . Тогда гамильтониан статической модели  $H_S$  записывается в виде

$$H_S = \sum_{r, r' \in \Lambda} t_{rr'} a_r^+ a_{r'} + U \sum_{r \in \Lambda} n_r W(r) - \mu \sum_{r \in \Lambda} n_r, \quad (2)$$

где операторы  $a_r^+$  и  $a_r$  относятся к бесспиновым электронам (остающимся фермионами), которые взаимодействуют с тяжелыми ионами. Параметр  $U$  приобретает теперь смысл константы электрон-ионного взаимодействия.

Положения ионов задаются функцией  $W(r)$  и при нулевой температуре должны быть выбраны так, чтобы минимизировать энергию основного состояния  $H_S$ . При  $T > 0$  необходимо вычислить статистическую сумму при фиксированном  $W(r)$ , а затем усреднить ее по всем  $W(r)$ . Состояние системы, таким образом, определяется многочастичным эффективным взаимодействием между ионами, зависящим от температуры.

Наша задача состоит в вычислении эффективного взаимодействия между двумя ионами  $V(r_1, r_2)$ . Точки  $r_1$  и  $r_2$  - произвольные узлы решетки, на которой определен гамильтониан (2) с условием  $W(r_1) = W(r_2) = 1$  и  $W(r) = 0$  для  $r \neq r_1, r \neq r_2$ . В дальнейшем для простоты изложения будем считать решетку  $\Lambda$  двумерной. Обобщение основного результата на случай произвольной размерности не вызывает затруднений. Целыми числами  $L_1$  и  $L_2$  обозначим размер решетки по горизонтали и вертикали. Примем периодические граничные условия в обоих направлениях, а также положим  $t_{rr'} = 1$  для всех пар ближайших соседей, что сводится к замене  $U$  на  $U/t$  и  $\mu$  на  $\mu/t$ .

Для того чтобы сформулировать исходную модель в терминах случайных блужданий, воспользуемся обычным приемом: перейдем от квантово-механической задачи на двумерной решетке к эквивалентной трехмерной классической задаче. Средством для такого перехода является формула Троттера<sup>/6/</sup>. Полагая

$$H_0 = \sum_{r, r' \in \Lambda} a_r^\dagger a_{r'}$$

и

$$H_1 = U \sum_{r \in \Lambda} n_r W(r) - \mu \sum_{r \in \Lambda} n_r,$$

представим гамильтониан  $H_S$  в виде суммы двух слагаемых

$$H_S = H_0 + H_1. \quad (3)$$

Следуя [7], запишем формулу Троттера в форме

$$e^{-\beta H} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ e^{-\frac{\beta H_S}{N}} \left( 1 - \frac{\beta}{N} H_0 \right) \right]^N. \quad (4)$$

Ортонормированный базисом в пространстве состояний является набор антисимметричных собственных векторов оператора чисел заполнения  $n_r$  для всех  $r \in \Lambda$ . Каждому вектору с числами заполнения  $\{n_r\}$  соответствует некоторая конфигурация электронов на решетке. Оператор  $a_r^\dagger a_{r'}$ , действуя на данный вектор, перемещает один электрон в соседний узел решетки.

Рассмотрим произведение  $N$  одинаковых сомножителей в правой части (4), перенумеровав их справа налево числами  $1, 2, \dots, N$ . Оператор  $a_r^\dagger a_{r'}$ , находящийся в  $i$ -м сомножителе, снабдим индексом  $i$ :  $a^{\dagger}(i) a(i)$ . Раскрывая произведение (4), мы получим сумму членов вида

$$e^{-\frac{\beta}{N} H_1} \left( -\frac{\beta}{N} \right) a^{\dagger}(i_n) a(i_n) \dots e^{-\frac{\beta}{N} H_1} \left( -\frac{\beta}{N} \right) a^{\dagger}(i_1) a(i_1), \quad (5)$$

где

$$1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n \leq N.$$

Сопоставим последовательности сомножителей  $1, 2, \dots, N$  последовательность конфигураций электронов  $C(0), C(1), \dots, C(N)$ . Если  $i_1 > 1$ , конфигурация  $C(1)$  совпадает с исходной конфигурацией  $C(0)$ . Если  $i_1 = 1$ , электрон, находящийся в  $C(0)$  в узле  $r'$ , перемещается в узел  $r$ :

$$C(1) = a^{\dagger}(i_1) a(i_1) C(0) = a_r^\dagger a_{r'} C(0).$$

Вообще, любая конфигурация  $C(j)$  совпадает с предыдущей  $C(j-1)$ , если среди чисел  $i_1, i_2, \dots, i_n$  нет совпадающих с  $j$ . В противном случае  $C(j)$  и  $C(j-1)$  отличаются положением одного электрона. Изменение координаты электрона в соседних конфигурациях назовем скачком. При переходе от одной конфигурации к другой число электронов не меняется. Последовательность  $C \equiv \{C(i)\}$  можно рассматривать как траекторию электронов. При этом числа  $1, 2, \dots, N$  приобретают смысл дискретных моментов времени. Потребуем выполнения условия  $C(0) = C(N)$ . Тогда кроме периодических граничных условий в плоскости появляются периодические условия в третьем измерении. Получившаяся трехмерная решетка представляет собой набор  $N$  плоскостей размером  $L_1 \times L_2$ , каждая из которых пересекается траекторией электронов. Траектории направлены сверху вниз от плоскости с номером 1 до плоскости с номером  $N$ . Из-за периодических условий все траектории замкнуты.

Определим  $\omega(c)$  - статистический вес траектории  $C$ . Вес  $\omega(c)$  определяется двумя факторами. Первый из них связан с членом  $H_1$  в сумме (3). Пусть  $C$  - траектория  $k(c)$  электронов. Пусть, далее, в траектории  $C$  за время  $N$  происходит  $m(c)$  попаданий электронов в узлы  $r_1$  и  $r_2$ , в которых находятся ионы. Каждому электрону соответствует весовой множитель  $e^{\mu\beta}$ , а каждому попаданию электрона на ион - множитель  $e^{U\beta/N}$ . Тогда фактор, связанный с  $H_1$ , равен

$$e^{k\mu\beta} e^{-\frac{mU\beta}{N}}.$$

Второй фактор связан с числом скачков электронов. Если общее число скачков всех электронов за время  $N$  равно  $\ell(c)$ , то второй фактор равен  $(-\beta/N)^\ell$ . Общий вес траектории  $C$  можно записать в виде

$$\omega(c) = \text{sign}(c) \left( -\frac{\beta}{N} \right)^\ell e^{k\mu\beta} e^{-\frac{mU\beta}{N}}. \quad (6)$$

Для определения знака траектории  $\text{sign}(c)$  необходимо учесть ферми-статистику электронов. Рассмотрим конфигурацию  $C(0)$ , в которой  $k$  электронов занимают множество  $V_k$  узлов решетки. Конфигурация  $C(N)$  отличается от  $C(0)$  перестановкой положений электронов. Известно, что если дана перестановка  $P$ , то множество  $V_k$  можно разбить на подмножества, такие, что их элементы переставляются циклически. Эти подмножества называются циклами. Пусть  $V_k$  разбивается на  $\nu_1$  циклов длины 1,  $\nu_2$  циклов длины 2 и т.д., так что

$$\nu_1 + 2\nu_2 + 3\nu_3 + \dots = k.$$

Цикл длины 1 соответствует возвращению электрона за время  $N$  в тот же узел, в котором он находился в конфигурации  $C(0)$ . Цикл длины 2 соответствует перестановке положений двух электронов за время  $N$  и вносит в весовой множитель знак  $(-1)$ . Продолжая эти рассуждения дальше, мы видим, что знак  $(-1)$  возникает только в циклах четной длины. Следовательно,

$$\text{sign}(c) = (-1)^{\nu_2 + \nu_4 + \nu_6 + \dots} \quad (7)$$

Теперь мы можем написать выражение для статсуммы в виде

$$\Lambda_N = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_c \omega(c), \quad (8)$$

где суммирование производится по всем возможным траекториям электронов.

До сих пор мы не обсуждали одно важное свойство траекторий. Согласно принципу Паули, два электрона не могут находиться в одном узле, поэтому их траектории не пересекаются. Мы можем, однако, не учитывать это правило явно, так как вклад от пересекающихся траекторий в статсумму (8) равен нулю. Действительно, любой паре пересекающихся траекторий с циклами длины  $m$  и  $n$  можно сопоставить одну траекторию с циклом длины  $m+n$ , дающую вклад с противоположным знаком. Поэтому суммирование в (8) можно распространить на все траектории электронов, не заботясь об их пересечении.

Формуле (8) можно придать более удобную форму, если учесть, что вес траектории равен произведению весов всех циклов, входящих в нее. Обозначив вес цикла  $s$  через  $\omega(s)$ , получим

$$\sum_c \omega(c) = \prod_s (1 + \omega(s)), \quad (9)$$

где произведение берется по всем возможным циклам на решетке. Выражение (9) позволяет записать свободную энергию системы для фиксированного  $N$  в виде

$$-\beta F_N = \ln \Lambda_N = \ln \prod_s (1 + \omega(s)) = \sum_s \sum_{j=1}^{\infty} \frac{-[-\omega(s)]^j}{j}. \quad (10)$$

Суммирование по циклам затруднено тем обстоятельством, что среди множества циклов нет периодических путей, таких, в которых одна и та же траектория проходит многократно. Чтобы избежать этой трудности, мы можем интерпретировать выражение  $-[-\omega(s)]^j$  как вес  $j$ -кратно повторяемого цикла. Свяжем с каждым циклом длины  $m$  замкнутый путь,

последовательно проходящий все конфигурации  $C(1), C(2), \dots, C(N)$   $m$  раз и возвращающийся в исходную точку. Обозначим через  $P_m(r, n)$  замкнутый путь, начинающийся в момент времени  $n$  ( $1 \leq n \leq N$ ) в узле двумерной решетки  $r \in \Lambda$ . Этот путь возвращается в исходную точку в момент времени  $n + mN$ . Заменим в формуле (10) суммирование по циклам  $s$  суммированием по всем путям, начинающимся и заканчивающимся в точках  $r \in \Lambda$  в различные моменты времени  $n$ . При этом непериодический путь, пройденный за время  $mN$  входит в сумму  $mN$  раз, так как любая его точка может служить началом. Периодический путь с периодом  $j$ , пройденный за время  $j mN$ , входит в сумму также  $mN$  раз, так как может иметь только  $mN$  начальных точек. Учитывая эти соображения, получим

$$\sum_s \sum_{j=1}^{\infty} \frac{-[-\omega(s)]^j}{j} = \sum_p \frac{\omega_K(r, n)}{K}, \quad (11)$$

где мы обозначили через  $\omega_K(r, n)$  вес пути  $P_m(r, n)$  за время  $K = mN$  и просуммировали по путям со всеми возможными значениями  $m, r, n$  без ограничений на периодичность.

Рассматривая траектории электронов как ломаные, последовательно соединяющие узлы конфигураций  $C(1), C(2), \dots, C(N)$ , можно считать каждый отрезок ломаной шагом пути двумерного случайного блуждания. Каждый шаг соответствует единичному отрезку времени и либо оставляет блуждающую точку на месте, либо сопровождается скачком в соседний узел решетки.

Обозначим через  $W_n(r|r_0)$  взвешенную сумму по всем путям из точки  $r_0$  в точку  $r$  за  $n$  шагов. Определим вес каждого шага:

(а) если шаг оставляет блуждающую точку в том же узле решетки и этот узел не совпадает с  $r_1$  и  $r_2$ , вес шага равен

$$e^{\frac{\mu\beta}{N}} e^{\frac{\pi i}{N}}; \quad (12a)$$

(б) если шаг оставляет блуждающую точку в одном из узлов  $r_1$  и  $r_2$ ,

$$e^{\frac{\mu\beta}{N}} e^{-\frac{U\beta}{N}} e^{\frac{\pi i}{N}}; \quad (12b)$$

(с) если шаг сопровождается скачком из узла, не совпадающего с  $r_1$  и  $r_2$ , в соседний узел -

$$e^{\frac{\mu\beta}{N}} \left(-\frac{\beta}{N}\right) e^{\frac{\pi i}{N}}; \quad (12c)$$

(д) если шаг сопровождается скачком из узла  $r_1$  или  $r_2$  -

$$e^{\frac{\mu\beta}{N}} e^{-\frac{U\beta}{N}} \left(-\frac{\beta}{N}\right) e^{\frac{\pi i}{N}}. \quad (I2д)$$

При таком определении шага мы получаем общий вес траектории, совпадающий с определением (6). Остается, однако, разница в знаке: согласно определению (I2) из-за фактора  $e^{\pi i/N}$  замкнутый путь длины  $K = kN$  имеет знак  $(-1)^k$ , а согласно (7) вес  $w_k(r, n)$  такого пути имеет противоположный знак:  $-(-1)^k$ . Следовательно,

$$\sum_P \frac{w_k(r, n)}{k} = -N \sum_{r \in \Lambda} \sum_K \frac{W_k(r|r)}{k}, \quad (I3)$$

где мы учли эквивалентность всех моментов времени  $n = 1, 2, \dots, N$ , взятых в качестве начального момента блуждания. Из формул (I0)-(I3) следует окончательное выражение для свободной энергии в терминах случайных блужданий:

$$\beta F = \lim_{N \rightarrow \infty} \beta F_N = \lim_{N \rightarrow \infty} N \sum_{r \in \Lambda} \sum_K \frac{W_k(r|r)}{k}. \quad (I4)$$

Обратимся теперь к нашей основной задаче - определению парного потенциала  $V(r_1, r_2)$ . Введем обозначения

$$x = e^{\frac{\mu\beta}{N}} e^{\frac{\pi i}{N}}, \quad a = e^{-\frac{U\beta}{N}}, \quad t = \left(-\frac{\beta}{N}\right). \quad (I5)$$

Параметр  $a$  определяется константой электрон-ионного взаимодействия  $U$ : Введем две переменные  $a_1$  и  $a_2$ , отвечающие взаимодействию  $U_1$  и  $U_2$  с ионами в узлах  $r_1$  и  $r_2$ . Рассмотрим свободную энергию  $F(a_1, a_2)$  как функцию  $a_1$  и  $a_2$ . Парный потенциал  $V(r_1, r_2)$  определяется соотношением

$$V(r_1, r_2) = F(a, a) - F(1, a) - F(a, 1) + F(1, 1) \quad (I6)$$

или

$$V(r_1, r_2) = \int_1^a \frac{\partial F(a_1, a)}{\partial a_1} da_1 - \int_1^a \frac{\partial F(a_1, 1)}{\partial a_1} da_1. \quad (I7)$$

Заметим, что величина

$$-\beta a_1 \frac{\partial F(a_1, a)}{\partial a_1} \quad (I8)$$

совпадает со средним числом попаданий траектории в узел  $r_1$  при условии, что параметры электрон-ионного взаимодействия в узлах  $r_1$  и  $r_2$  равны

$a_1 = e^{-\beta U_1}$  и  $a = e^{-\beta U}$ . Соответственно, величина

$$-\beta a_1 \frac{\partial F(a_1, 1)}{\partial a_1} \quad (I9)$$

есть среднее число попаданий траектории в узел  $r_1$ , в котором находится ион с параметром взаимодействия  $a_1$ , а узел  $r_2$  свободен. Справедливо равенство

$$\beta a_1 \frac{\partial F_N(a_1, a)}{\partial a_1} = N \sum_K W_k(r_1|r_1; a_1, a), \quad (20)$$

где мы явно указали зависимость  $W_k$  от параметров взаимодействия с ионами в узлах  $r_1$  и  $r_2$ . Поясним формулу (20). Дифференцирование по  $a_1$  отбирает среди путей, входящих в сумму (14), только те, которые хотя бы один раз попадают в точку  $r_1$ . Если путь попадает в  $r_1$   $\nu$  раз, то его вес содержит множитель  $a_1^\nu$ . Действие оператора  $a_1 \partial / \partial a_1$  приводит к появлению перед этим весом множителя  $\nu$ . Значит в левой части (20) каждый путь, попадающий в точку  $r_1$   $\nu$  раз встречается  $\nu$  раз. Множитель  $N$  в правой части (20) означает, что каждый путь начинается в моменты времени  $n = 1, 2, \dots, N$  в точке  $r_1$ . Поэтому путь, попадающий в  $r_1$   $\nu$  раз в моменты времени  $1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_\nu \leq N$ , также встречается  $\nu$  раз в правой части равенства (20).

Объединяя формулы (I7) и (20), получим

$$V(r_1, r_2) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{\beta} \left\{ \int_1^a \frac{da_1}{a_1} \sum_K W_k(r_1|r_1; a_1, a) - \int_1^a \frac{da_1}{a_1} \sum_K W_k(r_1|r_1; a_1, 1) \right\} \quad (21)$$

Для вычисления суммы по  $k$  в (21) мы должны выбрать из всех замкнутых путей только те, которые имеют длину, кратную  $N$ :  $K = kN$ ,  $k = 1, 2, \dots$ . Это легко сделать, добавляя к весу каждого шага дополнительный множитель:

$$\xi_j = x e^{\frac{2\pi i}{N} j}. \quad (22)$$

Тогда суммирование по числу шагов  $K$ , кратному  $N$ , можно заменить суммированием по  $j$  и по всем возможным значениям числа шагов  $n$ :

$$N \sum_K W_k(r_1|r_1) = \sum_{j=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} W_n(r_1|r_1) - 1, \quad (23)$$

так как

$$\sum_{j=1}^N e^{2\pi i \frac{jn}{N}} = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq 0 \pmod{N}, \\ N & \text{при } n = 0 \pmod{N}. \end{cases} \quad (24)$$

Единица в правой части (23) компенсирует член  $W_0(r_1|r_1) = 1$ , отсутствующий в левой части. Формулы (21) и (23) сводят проблему вычисления парного потенциала к вычислению производящей функции простых блужданий, начинающихся и заканчивающихся в одной точке:

$$W(r_1|r_1) = \sum_{n=0}^{\infty} W_n(r_1|r_1). \quad (25)$$

### 3. ОБЩАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО ПАРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Расчет производящей функции случайных блужданий на решетке с двумя примесными узлами относится к числу стандартных задач теории случайных блужданий. Мы воспользуемся для решения этой задачи техникой, развитой в работе Монтролла<sup>8/</sup>.

Обозначим через  $W_n(\vec{r}|\vec{r}_0)$  сумму по всем взвешенным путям из точки  $\vec{r}_0$  в точку  $\vec{r}$  за  $n$  шагов в присутствии примесей в точках  $\vec{r}_1$  и  $\vec{r}_2$ . Поместим ради определенности точку  $\vec{r}_1$  в начало координат, а точку  $\vec{r}_2$  обозначим через  $\vec{R}$  с координатами  $(R_1, R_2)$ . Координаты произвольного узла  $\vec{r} \in \Lambda$  обозначим через  $(\ell_1, \ell_2)$ ,  $1 \leq \ell_1 \leq L_1$ ;  $1 \leq \ell_2 \leq L_2$ . Уравнение эволюции для  $W_n(\vec{r}|\vec{r}_0)$  имеет вид

$$W_{n+1}(\vec{r}|\vec{r}_0) = \sum_{\vec{r}'} \gamma(\vec{r}, \vec{r}') W_n(\vec{r}'|\vec{r}_0), \quad (26)$$

где матрица перехода  $\gamma(\vec{r}, \vec{r}')$  состоит из двух слагаемых

$$\gamma(\vec{r}, \vec{r}') = p(\vec{r} - \vec{r}') + q(\vec{r}, \vec{r}'). \quad (27)$$

Здесь  $p(\vec{r} - \vec{r}')$  представляет собой трансляционно инвариантную часть:

$$p(\vec{r} - \vec{r}') = x \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} + xt (\delta_{\ell_1, \ell_1+1} \delta_{\ell_2, \ell_2'} + \delta_{\ell_1, \ell_1-1} \delta_{\ell_2, \ell_2'} + \delta_{\ell_1, \ell_1} \delta_{\ell_2, \ell_2'+1} + \delta_{\ell_1, \ell_1} \delta_{\ell_2, \ell_2'-1}), \quad (28)$$

а матрица  $q(\vec{r}, \vec{r}')$  связана с присутствием "дефектов":

$$\begin{aligned} q(\vec{r}, \vec{r}') &= 0; \quad \vec{r}' \neq \vec{r}_1, \quad \vec{r}' \neq \vec{r}_2 \\ &= (a_1 x - x) \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} + (a_1 x t - xt) (\delta_{\ell_1, 1} \delta_{\ell_2, 0} + \delta_{\ell_1, -1} \delta_{\ell_2, 0} + \delta_{\ell_1, 0} \delta_{\ell_2, 1} + \delta_{\ell_1, 0} \delta_{\ell_2, -1}), \quad \vec{r}' = \vec{r}_1, \\ &= (a_2 x - x) \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} + (a_2 x t - xt) (\delta_{\ell_1, R_1+1} \delta_{\ell_2, R_2} + \delta_{\ell_1, R_1-1} \delta_{\ell_2, R_2} + \delta_{\ell_1, R_1} \delta_{\ell_2, R_2+1} + \delta_{\ell_1, R_1} \delta_{\ell_2, R_2-1}); \quad \vec{r}' = \vec{r}_2. \end{aligned} \quad (29)$$

В формулах (28) и (29) вес каждого шага взят в соответствии с определениями (12) и (15). Из уравнения (26) следует уравнение для производящей функции

$$W(\vec{r}|\vec{r}_0) = \delta_{\vec{r}, \vec{r}_0} + \sum_{\vec{r}'} \gamma(\vec{r}, \vec{r}') W(\vec{r}'|\vec{r}_0). \quad (30)$$

Определим дискретное Фурье-преобразование  $\tilde{W}(\vec{\psi}|\vec{r}_0) \equiv \tilde{W}(\psi_1, \psi_2|\vec{r}_0)$

функции  $W(\vec{r}|\vec{r}_0) \equiv W(\ell_1, \ell_2|\vec{r}_0)$ .

Введя обозначение  $\varphi_1 = \frac{2\pi i}{L_1} j_1$  и  $\varphi_2 = \frac{2\pi i}{L_2} j_2$ , запишем

$$\tilde{W}(\psi_1, \psi_2|\vec{r}_0) = \sum_{\ell_1=1}^{L_1} \sum_{\ell_2=1}^{L_2} e^{i\varphi_1 \ell_1 + i\varphi_2 \ell_2} W(\ell_1, \ell_2|\vec{r}_0); \quad (31)$$

$$W(\ell_1, \ell_2|\vec{r}_0) = \frac{1}{L_1 L_2} \sum_{j_1=1}^{L_1} \sum_{j_2=1}^{L_2} e^{-i\varphi_1 \ell_1 - i\varphi_2 \ell_2} \tilde{W}(\psi_1, \psi_2|\vec{r}_0).$$

Из уравнения (30) имеем

$$\begin{aligned} \tilde{W}(\vec{\psi}|\vec{r}_0) (1 - x \lambda(\vec{\psi})) &= e^{i\vec{\psi} \vec{r}_0} + (a_1 - 1) x \lambda(\vec{\psi}) e^{i\vec{\psi} \vec{r}_1} W(\vec{r}_1|\vec{r}_0) + \\ &+ (a_2 - 1) x \lambda(\vec{\psi}) e^{i\vec{\psi} \vec{r}_2} W(\vec{r}_2|\vec{r}_0). \end{aligned} \quad (32)$$

где  $\lambda(\vec{\psi})$  - структурный фактор:

$$\lambda(\vec{\psi}) = 1 + 2t \cos \varphi_1 + 2t \cos \varphi_2. \quad (33)$$

Производя обратное Фурье-преобразование уравнения (32), мы совершим термодинамический предельный переход  $L_1, L_2 \rightarrow \infty$ , который позволяет перейти от суммирования по  $j_1$  и  $j_2$  к интегрированию по  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ . Введем функции

$$G(\vec{r}|\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \frac{e^{i\vec{\psi}(\vec{r}' - \vec{r})}}{1 - x \lambda(\vec{\psi})} d\varphi_1 d\varphi_2, \quad (34)$$

$$H(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \frac{x \lambda(\vec{\psi}) e^{i\vec{\psi} \vec{r}}}{1 - x \lambda(\vec{\psi})} d\varphi_1 d\varphi_2. \quad (35)$$

Обратное Фурье-преобразование (32) дает

$$W(\vec{r}|\vec{r}_0) = G(\vec{r}|\vec{r}_0) + (a_1 - 1) H(\vec{r}_1 - \vec{r}) W(\vec{r}_1|\vec{r}_0) + (a_2 - 1) H(\vec{r}_2 - \vec{r}) W(\vec{r}_2|\vec{r}_0). \quad (36)$$

Положим теперь  $\vec{r}_1 = 0$ ,  $\vec{r}_2 = \vec{R}$ ,  $a_2 = a$ . Тогда для определения функции  $W(0|0) \equiv W(0|0; a_1, a)$  получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} W(0|0) &= G(0|0) + (a_1-1)H(0)W(0,0) + (a_1-1)H(\vec{R})W(\vec{R}|0), \\ W(\vec{R}|0) &= G(\vec{R}|0) + (a_1-1)H(\vec{R})W(0,0) + (a_1-1)H(0)W(\vec{R}|0), \end{aligned} \quad (37)$$

имеющую решение

$$W(0|0) = \frac{G(0|0) - (a_1-1)H(0)G(0|0) + (a_1-1)H(\vec{R})G(0|\vec{R})}{[1 - (a_1-1)H(0)][1 - (a_1-1)H(\vec{R})] - (a_1-1)^2 H^2(\vec{R})}. \quad (38)$$

Согласно формулам (21), (23), (25) потенциал  $V(\vec{R})$  выражается через интеграл по  $a_1$  от функции  $W(0|0)$ . Несложные выкладки дают

$$\int_1^a \frac{da_1}{a_1} [W(0|0; a_1, a) - 1] = \ln \left| \frac{[1 - (a_1-1)H(0)]^2 - (a_1-1)^2 H^2(\vec{R})}{1 - (a_1-1)H(0)} \right|. \quad (39)$$

Для получения второго члена в выражении (21) необходимо найти функцию  $W(0|0) \equiv W(0|0; a_1, 1)$ . Полагая  $a_2 = 1$  в уравнении (36), получим

$$W(0|0) = \frac{G(0|0)}{1 - (a_1-1)H(0)}. \quad (40)$$

В этом случае

$$\int_1^a \frac{da_1}{a_1} [W(0|0; a_1, 1) - 1] = \ln |1 - (a_1-1)H(0)|. \quad (41)$$

Подставляя выражения (40) и (41) в (21) и пользуясь формулами (22), (23) и (25), получим окончательное выражение для потенциала  $V(\vec{R})$ .

$$V(\vec{R}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \sum_{j=1}^N \ln \left| \frac{[1 - (a_1-1)H(0)]^2 - (a_1-1)^2 H^2(\vec{R})}{[1 - (a_1-1)H(0)]^2} \right|. \quad (42)$$

Выражение (42) приобретает особенно простой вид в случае бесконечного отталкивающего потенциала  $U$ , когда  $a = 0$ . В этом случае, используя очевидные соотношения между функциями  $G$  и  $H$ , получим

$$V(\vec{R}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \sum_{j=1}^N \ln |1 - F^2(\vec{R})|. \quad (43)$$

где

$$F(\vec{R}) = \frac{G(0|\vec{R})}{G(0|0)}. \quad (44)$$

Функция  $F(\vec{R})$  хорошо известна в теории случайных блужданий<sup>/9/</sup>. Для простого случайного блуждания с весами (15) она представляет собой производящую функцию первого достижения блуждающей частицей точки  $\vec{R}$ , если в начальный момент времени она находилась в начале координат.

С помощью формулы (43) можно дать наглядную интерпретацию эффективного парного взаимодействия. Рассмотрим формальное разложение

$$\ln(1 - F^2) = - \left[ F^2 + \frac{F^4}{2} + \frac{F^6}{3} + \dots \right]. \quad (45)$$

Функция  $F^2$  перечисляет все пути из точки 0 до первого попадания в точку  $\vec{R}$  и обратно до первого попадания в точку 0. Функция  $F^4$  перечисляет все пути вида  $0 \rightarrow \vec{R} \rightarrow 0 \rightarrow \vec{R} \rightarrow 0$ . Каждый такой путь два раза попадает в точку 0 и поэтому перечисляется дважды. Знаменатель 2 компенсирует это удвоение. Весь ряд (45), таким образом, однократно перечисляет все возможные пути из точки 0 в точку  $\vec{R}$  и обратно. Суммирование по  $j$ , согласно (24), отбирает из этого множества все пути с числом шагов, кратным  $N$ .

При получении формул (42) и (43) нигде не использовалась специфика двумерного случая. Для произвольной размерности эти формулы сохраняют свою справедливость, если заменить функцию Грина  $G(\vec{r}|\vec{r}')$  и  $H(\vec{r})$  их  $d$ -мерным обобщением.

#### 4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Формулы (42) и (43) дают зависимость эффективного парного потенциала от температуры и химпотенциала  $\mu$ . Для анализа полученных результатов полезно найти еще зависимость плотности электронов от этих параметров. Мы приведем выражение для  $\rho_e$  в том виде, в котором оно получается в развитом выше формализме для того, чтобы дать представление об особенностях вычислительной процедуры в (42) и (43). Выражение для  $\rho_e$  легко получить, последовательно применяя формулы (18), (20), (23) и (40), в которых нужно положить  $a = a_1 = 1$  и использовать выражение (34) для функции Грина  $G$ . Результат имеет следующий вид:



$$f_e = -\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\chi e^{2\pi i j/N} (1 - \frac{2\beta}{N} \cos \varphi_1 - \frac{2\beta}{N} \cos \varphi_2)}{1 - \chi e^{2\pi i j/N} (1 - \frac{2\beta}{N} \cos \varphi_1 - \frac{2\beta}{N} \cos \varphi_2)} \quad (46)$$

Из выражения (46) видно, что обычный переход от суммы к интегралу невозможен из-за фактора  $(\beta/N)$  в знаменателе подынтегрального выражения. Действительно, по мере того как суммирование по  $j$  стремится к интегралу по контуру, нули знаменателя приближаются к этому контуру и предельное значение  $f_e$  зависит от относительной скорости этих предельных переходов. Поэтому для вычисления  $f_e$  мы должны вычислить сумму по  $j$  в явном виде и лишь затем взять предел  $N \rightarrow \infty$ . Разлагая подынтегральное выражение в ряд по параметру  $\exp(2\pi i j/N)$  и применяя формулу (24) к каждому члену разложения, мы получим в пределе  $N \rightarrow \infty$ :

$$f_e = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\exp[\beta(\mu - 2\cos \varphi_1 - 2\cos \varphi_2)]}{1 + \exp[\beta(\mu - 2\cos \varphi_1 - 2\cos \varphi_2)]} d\varphi_1 d\varphi_2 \quad (47)$$

Разумеется, выражение (47) есть не что иное, как обычная формула для плотности идеального ферми-газа

$$n = \frac{1}{V} \sum_p \frac{e^{\beta \mu} e^{-\beta \epsilon_p}}{1 + e^{\beta \mu} e^{-\beta \epsilon_p}}$$

с собственными значениями  $\epsilon_p = 2\cos \varphi_1 + 2\cos \varphi_2$ , полученными из периодических граничных условий.

Пример вычисления  $f_e$  показывает, что предельный переход по в формулах (42) и (43) должен быть выполнен после вычисления суммы. Поэтому мы провели численные расчеты для различных значений  $N$ , добиваясь сходимости при заданной точности вычислений.

Все расчеты проведены для случая бесконечного отталкивающего потенциала  $U = \infty$  с помощью формулы (43). Значения  $V(\vec{R})$ ,  $0 < R_1 \leq 5$ ,  $0 < R_2 \leq 5$  при  $\beta = 10$  приведены в таблицах 1, 2, 3. В таблице 1 помещены значения  $V(\vec{R})$ , полученные при  $\mu = 0$ , в таблице 2  $\mu = 1,48$ , в таблице 3  $\mu = 3$ . Рисунки 1-3 иллюстрируют эти численные данные. Размер кружка на этих рисунках соответствует величине потенциала, его цвет - знаку: для черных кружков  $V > 0$ , для белых  $V < 0$ .

Поскольку структура ионной решетки зависит, главным образом, от деталей ион-ионного взаимодействия на малых расстояниях, мы более под-

Таблица 1. Значение  $U(\vec{R})$  для  $\beta = 10$  и  $\mu = 0$

$R_1 \backslash R_2$	1	2	3	4	5
0	1.562	-0.047	0.040	-0.003	0.002
1	-1.088	0.215	-0.003	0.013	-0.002
2		-0.312	0.093	-0.003	0.004
3			-0.142	0.051	-0.002
4				-0.076	0.031
5					-0.045

Таблица 2. Значения  $U(\vec{R})$  для  $\beta = 10$  и  $\mu = 1.48$

$R_1 \backslash R_2$	1	2	3	4	5
0	1.575	-0.140	0.027	0.001	-0.009
1	0.000	-0.111	0.024	0.007	-0.012
2		0.136	-0.033	-0.034	-0.019
3			0.001	0.024	-0.015
4				-0.040	0.022
5					-0.002

Таблица 3. Значения  $U(\vec{R})$  для  $\beta = 10$  и  $\mu = 3$

$R_1 \backslash R_2$	1	2	3	4	5
0	0.901	-0.135	-0.080	0.024	0.006
1	0.523	-0.016	-0.074	0.030	0.002
2		-0.121	-0.009	0.035	-0.009
3			-0.042	0.010	-0.017
4				-0.017	-0.007
5					0.007

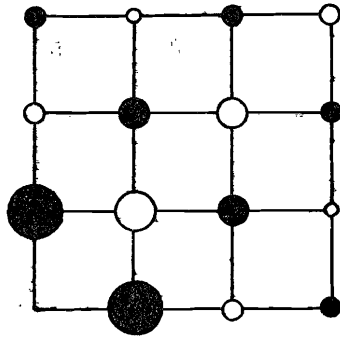


Рис. 1.

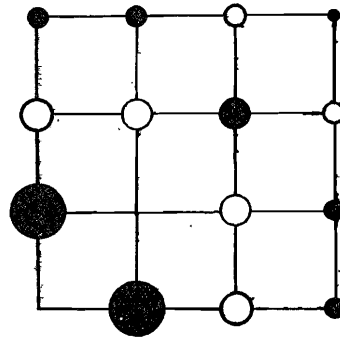


Рис. 2.

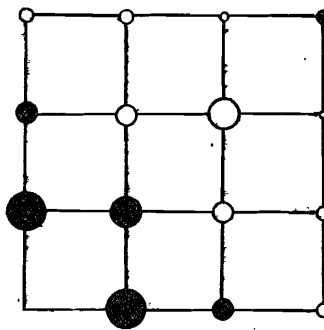


Рис. 3.

робо изучил поведение  $V(\vec{R})$  в первой и второй координационных сферах для  $\vec{R} = (0,1)$  и  $\vec{R} = (1,1)$ . На рис. 4 представлена зависимость  $V(0,1)$  (верхняя кривая) и  $V(1,1)$  (нижняя кривая) от химического потенциала  $\mu$  для  $\beta = 2,5$ . На рис. 5 даны эти же зависимости для случая  $\beta = 5$ . Дальнейшее увеличение  $\beta$  приводит к увеличению масштаба, не изменяя качественно хода кривых. Симметрия кривых относительно оси ординат есть следствие симметрии электронов и дырок в случае бесконечного отталкивающего потенциала  $U$ .

На основании полученных численных данных мы можем сделать некоторые заключения о возможных типах кристаллического упорядочения ионов, предполагая, что основную роль в образовании ионной решетки играет парное взаимодействие, а влияние многочастичного взаимодействия относительно мало. Рассмотрим отдельно несколько частных случаев.

1. Случай  $\mu = 0$ . Согласно (47), этот случай соответствует плотности электронов  $\rho_e = 1/2$ . Это значение плотности, при котором справедлива теорема 4.1 работы [1]. Теорема утверждает существование дальнего порядка в статической модели при достаточно низких температурах. Пусть решетка разбивается на две подрешетки А и В таким образом, чтобы каждое ребро решетки соединяло узел А с узлом В. Тогда по теореме 4.1 предпочтительными положениями ионов оказываются узлы одной из подрешеток.

Из рис. 1 следует, что парный потенциал достигает своего максимума для соседних узлов, а минимума для узлов, расположенных по диагонали. Более того, положительные и отрицательные значения потенциала чередуются в шахматном порядке во всей изученной области  $\vec{R}$ . Такое поведение парного потенциала однозначно свидетельствует о преимущественном заполнении ионами подрешетки А или В.

2. Случай  $\mu \neq 0$ . На рисунках 4 и 5 видно, что значение потенциала  $V(0,1)$  для ближайших соседей всегда превосходит его значение  $V(1,1)$  для узлов, расположенных по диагонали. Это означает, что при фиксированной плотности ионов  $\rho_i = 1/2$  тип упорядочения, рассмотренный в предыдущем пункте, может сохраняться при любой плотности электронов для достаточно низких температур (при этом мы должны допустить большие, но конечные значения потенциала  $U$ ).

3. Случай  $|\mu| = 1,48$ . В этом случае  $\rho_e = 3/4$  для  $\mu > 0$  и  $\rho_e = 1/4$  для  $\mu < 0$ . Таблица 2 и рис. 2 показывают, что при этих значениях  $\rho_e$  минимум потенциала перемещается в точки  $(0, +2)$ ,  $(+2, 0)$ . Это делает возможной структуру, в которой ионы занимают узлы решетки

с четными координатами  $(2m, 2n)$ ,  $m, n \geq 0$  с плотностью ионов  $\rho_i = 1/4$ . Интересно отметить, что при  $\mu = 1,48$ , когда  $\rho_e = 3/4$ , сумма  $\rho_e + \rho_i$  находится на границе интервала, указанного в теореме 2.1 работы [1]. Согласно этой теореме при  $U > 0$  и при условии  $\rho_e + \rho_i \geq 1$  основное состояние статической модели реализуется при "шахматном" упорядочении ионов. Таким образом, в данной области значений окончательный выбор структуры зависит от тонкого баланса многочастичных потенциалов.

4. Случай  $|\mu| = 3$ . Значение  $\mu = -3$  соответствует низкой плотности электронов ( $\rho_e \approx 0,1$ ), а  $\mu = 3$  плотности, близкой к плотной упаковке ( $\rho_e \approx 0,9$ ). Согласно таблице 3 и рис.3 минимум потенциала находится теперь в точках  $(\pm 2, \pm 2)$ , что предполагает "шахматное" упорядочение с удвоенным шагом ( $\rho_i = 1/8$ ). Как и в п.3, новая структура энергетически выгодна при низкой плотности электронов. При высокой плотности, когда  $\mu = 3$ , сумма  $\rho_e + \rho_i > 1$  и находится

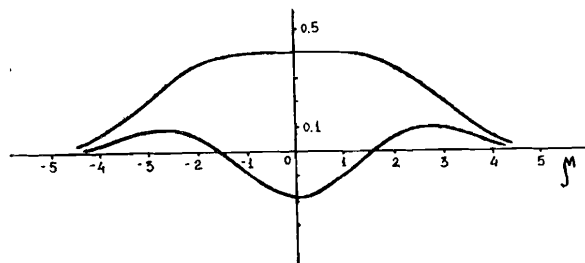


Рис.4.

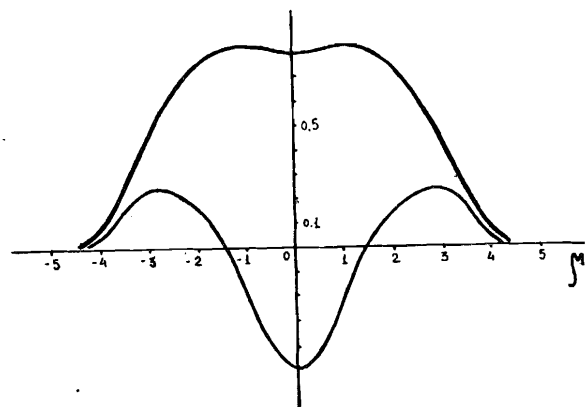


Рис.5.

в области применимости теоремы 2.1 работы [1], которая запрещает эту структуру. Отсюда можно заключить, что в области высоких плотностей электронов многочастичные электрон-ионные корреляции играют определяющую роль.

5. Случай  $|\mu| \gg 1$ . Непрерывный предел рассмотренной решеточной задачи получается, если одновременно устремить к нулю плотности электронов ( $\mu \rightarrow -\infty$ ) и шаг решетки. Тогда вокруг начала координат формируется кольцеобразная периодическая структура, соответствующая Фриделевским осцилляциям. То же происходит и в случае низкой плотности дырок, когда  $\mu \rightarrow \infty$ .

В заключение отметим, что применение формулы Троттера позволяет представить эффективный парный потенциал в удобной форме, выразив его через производящие функции случайных блужданий. Подробный анализ этого потенциала дает полезную информацию о поведении статической модели и позволяет сделать ряд предположений о возможных структурах ионной решетки. Справедливость этих предположений зависит от баланса многочастичных взаимодействий, особенно в области высокой плотности электронов. Проверка термодинамической устойчивости различных структур требует проведения энтропийных оценок, подобных аргументам Пайерлса.

Один из авторов (В. Б.П.) выражает благодарность Е. Енджеевскому за полезные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. T.Kennedy, E.H.Lieb, Physica, 138 A (1986) 320.
2. J.Hubbard, Proc.Roy.Soc. (London) Ser. A 276 (1963) 238.
3. D.Pines, Elementary excitations in solids (W.A.Benjamin, INC., N.Y. - Amsterdam 1963).
4. J.Lindhard, Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat.-Fys.Meld., 28 (1954) 8.
5. J.Friedel, Nuovo Cimento, Suppl 7 (1958) 287.
6. H.Trotter, Proc. Am. Math.Soc. 10 (1959) 545.
7. J.Glimbre, Commun.Math.Phys. 14 (1969) 205.
8. E.W. Montroll, J.Soc.Indust.Appl.Math. 4 (1956) 241.
9. E.W.Montroll, G.H.Weiss, J.Math.Phys. 6 (1965) 167.

Рукопись поступила в издательский отдел  
13 августа 1987 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р.55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р.00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р.50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р.30 к.
D1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р.50 к.
D10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983.	3 р.50 к.
D17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р.75 к.
D11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.00 к.
D13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985.	4 р.80 к.
D4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985.	3 р.75 к.
D3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р.50 к.
-	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. /2 тома/	13 р.50 к.
D1,2-86-668	Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. /2 тома/	7 р.35 к.
D9-87-105	Труды X Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1986. /2 тома/	13 р.45 к.
D7-87-68	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Дубна, 1986	7 р.10 к.
D2-87-123	Труды Совещания "Ренормгруппа-86". Дубна, 1986	4 р.45 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.

Литвин А.А., Приезжев В.Б.

P17-87-635

Эффективный парный потенциал в решеточном ферми-газе

Получена точная формула для эффективного парного потенциала в квантово-механической решеточной модели фермионов, взаимодействующих с двумя бесконечно тяжелыми ядрами. С помощью формулы Троттера найдена связь парного потенциала с производящими функциями случайных блужданий. Детальный анализ парного потенциала для соседних узлов показывает, что существуют различные возможности построить ядерную подрешетку, удерживаемую эффективным взаимодействием между ядрами.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Litvin A.A., Priezzhev V.B.

P17-87-635

Effective Pair Potential in the Lattice Fermi Gas

An effective pair potential for a quantum mechanical lattice model of fermions interacting with two infinitely massive nuclei is derived exactly. A relation between the nucleus-nucleus potential and random walk generating functions is obtained by using the Trotter product formula. The detailed analysis of the pair potential for neighbour sites shows that there exist various possibilities to construct a nuclear sublattice kept by the effective interaction between nuclei.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987