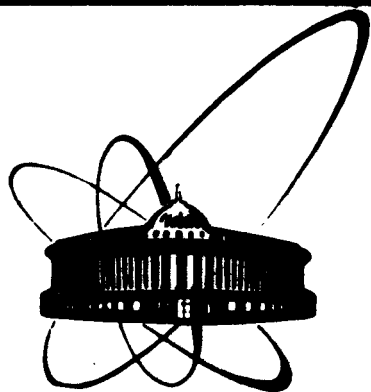


89-181



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

Ю 233

P17-89-181

В. И. Юкалов

**СИЛЬНОВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИЕ ЧАСТИЦЫ
С СИЛЬНОСИНГУЛЯРНЫМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ**

Направлено в "International Journal
of Theoretical Physics"

1989

1. Введение

При описании многочастичных систем, моделирующих конденсированные среды, существует известная проблема: атомы и молекулы, из которых состоит твердое тело или жидкость, не только сильно взаимодействуют между собой, так что теория возмущений становится плохо применимой, но, более того, межчастичные потенциалы взаимодействия обычно сильно сингулярны, так что теория возмущений вообще теряет смысл, поскольку все слагаемые ее ряда расходятся. Стандартный способ решения этой проблемы заключается в использовании различных расщеплений для высших корреляционных функций или функций Грина, когда учет двухчастичной корреляции компенсирует расходимость потенциала взаимодействия. В случае классических жидкостей парная корреляционная функция определяется уравнением Перкуса - Йевики или гиперцепным уравнением^{/1/}. Для квантовых систем парная функция Грина задается уравнением Бете - Солпитера^{/2,3/}. Используется также приближение, при котором форма бинарной корреляционной функции постулируется, а входящие в нее параметры находятся из эксперимента или из вариационной процедуры^{/4,5/}. Главным недостатком всех перечисленных методов является то, что неизвестно, как последовательно получать поправки, улучшающие точность выбранного расщепления.

Цель настоящей работы - построение регулярной процедуры, сочетающей достоинства метода расщеплений и теории возмущений, то есть процедуры, не содержащей расходимостей и в то же время позволяющей последовательно находить поправки к любому заданному приближению. Некоторые из аспектов построения такой процедуры обсуждались автором ранее^{/6-9/} и применялись для описания квантовых кристаллов^{/10-13/}. Здесь высказанные ранее идеи развиваются и обобщаются, в результате чего формулируется единый подход.

2. Сингулярные потенциалы

Взаимодействие между частицами часто описывается сингулярными потенциалами вида $\Phi(r) \sim r^{-n}$ при $n > 0$. Насколько такая степенная сингулярность опасна, зависит от интегрируемости потенциала взаимодействия, то есть от поведения интеграла

$$\int \Phi(r) d\vec{r} = 4\pi \int_a^{\infty} \Phi(r) r^2 dr.$$

Расходимости могут возникать на больших или на малых расстояниях. Первые соответствуют так называемым инфракрасным, вторые - ультрафиолетовым расходимостям. В рассматриваемом случае инфракрасная расходимость появляется при $0 < n < 3$, когда

$$\int_a^R \Phi(z) z^2 dz \sim R^{3-n} - a^{3-n} \rightarrow \begin{cases} \infty, & R \rightarrow \infty, \\ \text{const}, & a \rightarrow 0. \end{cases}$$

В проблеме многих тел инфракрасная расходимость устраняется в результате учета дальнедействующих корреляций. Например, при кулоновском взаимодействии ($n=1$) такие корреляции приводят к дебаевскому экранированию, перенормирующему потенциал на фактор $\exp(-r/r_D)$, где r_D - дебаевский радиус. Экранированный потенциал становится интегрируемым:

$$\int_0^{\infty} \Phi_3(r) r^2 dr = \alpha r_D^2 < \infty, \quad \Phi_3(r) = \frac{\alpha}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right).$$

Ультрафиолетовая расходимость возникает при $3 < n < \infty$, когда

$$\int_a^R \Phi(z) z^2 dz \sim R^{3-n} - a^{3-n} \rightarrow \begin{cases} \text{const}, & R \rightarrow \infty, \\ \infty, & a \rightarrow 0. \end{cases}$$

Для устранения этой расходимости необходимо принимать во внимание короткодействующую корреляцию. Маргинальный случай $n=3$ содержит логарифмические расходимости и на больших, и на малых расстояниях,

$$\int_a^R \Phi(z) z^2 dz \sim \ln R - \ln a \rightarrow \begin{cases} \infty, & R \rightarrow \infty, \\ \infty, & a \rightarrow 0. \end{cases}$$

Этот случай требует учета как дальнедействующих, так и короткодействующих корреляций.

В дальнейшем будем рассматривать сильносингулярные потенциалы с $n > 3$, когда для устранения ультрафиолетовой расходимости надо учитывать короткодействующую корреляцию. Такой тип сингулярности представляет большую сложность, так как простая теория возмущений неприменима, а метод расщеплений не позволяет находить высшие приближения. В то же время такие потенциалы достаточно распространены при описании конденсированных сред: можно упомянуть, например, очень популярный потенциал Леннарда - Джонса.

5. Основные формулы

Будем рассматривать многочастичную систему с гамильтонианом

$$H(t) = \int \psi^\dagger(\vec{r}, t) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \psi^\dagger(\vec{r}, t) \psi^\dagger(\vec{r}', t) \Phi(\vec{r}, \vec{r}') \psi(\vec{r}', t) \psi(\vec{r}, t) d\vec{r} d\vec{r}', \quad (1)$$

в котором $\hbar \equiv 1$, полевые операторы подчиняются уравнению Гейзенберга

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = [\psi(\vec{r}, t), H(t)], \quad (2)$$

функция $\mu(\vec{r}, t)$ включает химический потенциал и внешние поля, возможно, зависящие от времени. Средние значения от операторов $\hat{A}(t)$ определяются с помощью статистического оператора $\rho(t)$ выражением

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \rho(t) \hat{A}(0) = \text{Tr} \rho(0) \hat{A}(t). \quad (3)$$

Удобно использовать следующие сокращенные обозначения для функций

$$f(12 \dots n) \equiv f(\vec{r}_1, t_1, \vec{r}_2, t_2, \dots, \vec{r}_n, t_n) \quad (4)$$

и дифференциалов

$$d(12 \dots n) \equiv \prod_{i=1}^n d\vec{r}_i dt_i. \quad (5)$$

При этом, например, в качестве химического потенциала, потенциала взаимодействия и дельта-функции имеем

$$\begin{aligned} \mu(1) &\equiv \mu(\vec{r}_1, t_1), & \mathcal{J}(12) &\equiv \mathcal{J}(\vec{r}_1, -\vec{r}_2) \mathcal{J}(t_1, -t_2). \\ \Phi(12) &\equiv \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \mathcal{J}(t_1, -t_2 + 0), \end{aligned}$$

Определим причинные функции Грина, пропагаторы, выражениями: одночастичный пропагатор

$$G(12) \equiv -i \langle \hat{T} \psi(\vec{r}_1, t_1) \psi^\dagger(\vec{r}_2, t_2) \rangle \quad (6)$$

и двухчастичный пропагатор

$$B(1234) \equiv - \langle \hat{T} \psi(\vec{r}_1, t_1) \psi(\vec{r}_2, t_2) \psi^+(\vec{r}_3, t_3) \psi^+(\vec{r}_4, t_4) \rangle, \quad (7)$$

где \hat{T} - хронологический оператор.

Уравнения движения можно записать в форме^{/7/}

$$\int G^{-1}(13) G(32) d(3) = \delta(12), \quad (8)$$

здесь обратный пропагатор

$$G^{-1}(12) = \left[i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} + \mu(1) \right] \delta(12) - \Sigma(12), \quad (9)$$

а массовый оператор, или собственноэнергетическая часть,

$$\Sigma(12) = \pm i \int \Phi(13) B(1334) G^{-1}(42) d(34), \quad (10)$$

верхний знак для бозе-, нижний для ферми-частиц.

Решение всякой многочастичной задачи можно разделить на три последовательных этапа: 1) нахождение массового оператора и подстановка его в уравнение (8); 2) решение уравнения (8) для одночастичного пропагатора; 3) вычисление наблюдаемых величин по формуле (3).

4. Массовый оператор

Введем вершинную функцию (треугольную вершину)

$$\Gamma(123) \equiv - \frac{\delta^2 G^{-1}(12)}{\delta \mu(3)} \quad (11)$$

и функцию отклика

$$\chi(123) \equiv \frac{\delta^2 G(12)}{\delta \mu(3)}. \quad (12)$$

Варьируя уравнение (8) по $\mu(\cdot)$, получаем

$$\begin{aligned} \Sigma(12) = & \pm i \delta(12) \int \Phi(13) G(33) d(3) + \\ & + i \int \Phi(13) G(14) \Gamma(423) d(34), \end{aligned} \quad (13)$$

где диагональный одночастичный пропагатор определен равенством

$$G(11) \equiv \lim_{\vec{x}_2 \rightarrow \vec{x}_1} \lim_{t_2 - t_1 \rightarrow +0} G(12).$$

Треугольная вершина (II) и функция отклика (I2) связаны между собой соотношениями

$$\Gamma(123) = \delta(12) \delta(13) + \int \frac{\delta \Sigma(12)}{\delta G(45)} \chi(453) d(45), \quad (I4)$$

$$\chi(123) = \int G(14) G(52) \Gamma(453) d(45). \quad (I5)$$

Сравнивая (I3) и (I0), находим связь бинарного пропагатора с треугольной вершиной

$$B(1223) = G(13) G(22) \pm \int G(14) \Gamma(452) G(53) d(45).$$

Отсюда следует уравнение для бинарного пропагатора

$$B(1223) = G(13) G(22) \pm G(12) G(23) + \int \Lambda(1453) [B(4225) - G(45) G(22)] d(45), \quad (I6)$$

где

$$\Lambda(1234) \equiv \int G(15) \frac{\delta \Sigma(56)}{\delta G(23)} G(64) d(56). \quad (I7)$$

Вместо бинарного пропагатора (7) бывает удобнее использовать одевающую функцию $D(1234)$, определенную соотношением ^{19/}

$$B(1234) = \int D(1256) G(63) G(54) d(56).$$

Через одевающую функцию проще выражается массовый оператор (I0),

$$\Sigma(12) = \pm i \int \Phi(13) D(1324) G(43) d(34).$$

Уравнение для $D(1234)$ получается из (I6):

$$D(1234) = J(13)J(24) \pm J(14)J(23) + \int G(12) \frac{J \Sigma(73)}{J G(58)} G(68) \left[D(5264) - J(56)J(24) \right] d(5678)$$

Если решать получающиеся уравнения посредством простой итерации, начинающейся с $\Sigma = 0$, как это обычно делается в теории возмущений, то, естественно, при этом как раз и появятся ультрафиолетовые расходимости вследствие сильной сингулярности потенциала взаимодействия. Чтобы такие расходимости не возникали, перестроим уравнения, вводя трехточечный коррелятор

$$C(123) = \frac{B(1223)}{B(1223) - \int \Lambda(1453) [B(4225) - G(45)G(22)] d(45)} \quad (18)$$

Тогда (16) принимает вид

$$B(1223) = C(123) [G(13)G(22) \pm G(12)G(23)] \quad (19)$$

Систему уравнений (10), (17)-(19) будем решать по итерационной схеме

$$\begin{array}{ccccccc} B_0 & \longrightarrow & C_1 & \longrightarrow & B_1 & \longrightarrow & C_2 & \longrightarrow & B_2 & \longrightarrow & \dots \\ \downarrow & & \uparrow & & \downarrow & & \uparrow & & \downarrow & & \dots \\ \Sigma_1 & \longrightarrow & \Lambda_1 & \longrightarrow & \Sigma_2 & \longrightarrow & \Lambda_2 & \longrightarrow & \Sigma_3 & \longrightarrow & \dots \end{array}$$

За нулевое приближение здесь можно выбрать любое расщепление для бинарного пропагатора, не приводящее к расходимостям. В случае равновесной классической системы Кирквуд¹⁴ предложил простое расщепление для двухчастичной корреляционной функции: $f_2(\vec{r}, \vec{r}') = f_1(\vec{r}) f_1(\vec{r}') s(|\vec{r} - \vec{r}'|)$, где $f_1(\vec{r})$ - одночастичная функция распределения, $s(r)$ - функция, описывающая ближкодействующие корреляции между частицами. Расщепление Кирквуда можно обобщить на квантовый случай для пропагаторов с учетом их свойств симметрии:

$$B_0(1234) = s(12) [G(14)G(23) \pm G(13)G(24)]$$

Стартуя с этой нулевой итерации, по приведенной выше схеме нетрудно получить любые последовательные приближения. Так, в первом порядке имеем

$$\Sigma_1(12) = \pm i \mathcal{D}(12) \int \bar{\Phi}(13) G(33) d(3) + i \bar{\Phi}(12) G(12),$$

$$\Lambda_1(1234) = \pm i \mathcal{D}(23) \int G(15) \bar{\Phi}(52) G(54) d(5) + \\ + i G(12) \bar{\Phi}(23) G(34),$$

где введено обозначение

$$\bar{\Phi}(12) \equiv \mathcal{S}(12) \Phi(12). \quad (20)$$

Принципиально важно, что здесь, как и на любом другом шаге итерации, исходный сингулярный потенциал $\Phi(12)$ всегда стоит рядом с функцией близкодействующей корреляции $\mathcal{S}(12)$, которая сглаживает его сингулярности, делая сглаженный потенциал (20) интегрируемым. Поэтому $\mathcal{S}(12)$ можно назвать сглаживающей функцией. Для записи массового оператора во втором приближении используем формальные обозначения

$$V_0 = \mathcal{S} G G, \quad \Sigma_1 = \pm i \bar{\Phi} G, \quad \Lambda_1 = \pm i G \bar{\Phi} G.$$

При этом

$$\Sigma_a = \frac{\pm i \bar{\Phi} G G G}{\mathcal{S} G G \pm i G \bar{\Phi} G (G G - \mathcal{S} G G)}.$$

Снова убеждаемся, что потенциал взаимодействия входит в виде сглаженной комбинации (20).

5. Сглаживающая функция

Кирквуд^{/14/} предлагал находить близкодействующую корреляционную функцию из экспериментов по рассеянию света. Однако привлечение феноменологических соотношений снижает ценность теории. Далее предлагается рецепт последовательного теоретического построения сглаживающей функции.

Общие свойства функции, описывающей парные корреляции, были подробно исследованы Коулманом^{/15,16/}. В нашем случае сглаживающая функция, согласно ее определению, должна быть действительной и симметричной:

$$\mathcal{S}(12) = \mathcal{S}^*(12) = \mathcal{S}(21). \quad (21)$$

Корреляция между частицами на больших расстояниях должна исчезать, а на малых расстояниях сглаживающая функция должна стремиться к нулю, чтобы компенсировать расходимость потенциала взаимодействия:

$$g(r_{12}) \approx \begin{cases} 0, & r_{12} \rightarrow 0, \\ 1, & r_{12} \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (r_{12} \equiv |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|). \quad (22)$$

При этом подразумевается, что потенциал взаимодействия убывает до нуля при $r_{12} \rightarrow \infty$. Если потенциал зависит лишь от разности координат, $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, то естественно искать сглаживающую функцию в сферически-симметричной форме

$$g(r_{12}) = \int |\Psi(r_{12})|^2 r_{12}^2 d\Omega_2 \equiv g(r_{12}), \quad (23)$$

в которой Ω_2 - сферический угол относительно координаты \vec{r}_2 , а функция $\Psi(r_{12})$ определяется из условия минимизации двухчастичной энергии

$$E_{r_{12}} = \int \Psi^*(r_{12}) H(r_{12}) \Psi(r_{12}) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (24)$$

где двухчастичный гамильтониан

$$H(r_{12}) = -\frac{\nabla_1^2}{2m} - \frac{\nabla_2^2}{2m} + \Phi(r_{12}).$$

Обратим внимание на то, что Ψ (12) не является двухчастичной волновой функцией в буквальном смысле, так как условие на экстремум

$$\delta E_{r_{12}} / \delta \Psi^*(r_{12}) = 0$$

не содержит обычного условия нормировки. Получающееся уравнение

$$H(r_{12}) \Psi(r_{12}) = 0$$

отличается от уравнения Шредингера. Неизвестные константы, однозначно определяющие Ψ (12), находятся из асимптотических условий (22). В переменных

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$$

функция Ψ (12) факторизуется:

$$\Psi(r_{12}) = \Psi(\vec{R}) Y(\vartheta, \varphi) \frac{\chi(r)}{r},$$

где $\Psi(\vec{R}) \sim \text{const}$, $Y(\vartheta, \varphi)$ - сферическая функция, а $\chi(r)$ определяется уравнением

$$\frac{d^2 \chi(z)}{dz^2} - m \Phi(z) \chi(z) = 0. \quad (25)$$

В результате сглаживающая функция (23) принимает вид

$$g(z) = |\chi(z)|^2 = \chi^2(z). \quad (26)$$

Конкретизируем поведение сглаживающей функции для потенциала с асимптотическими свойствами

$$\Phi(z) \approx 4\varepsilon \begin{cases} (\sigma/z)^n, & z \rightarrow 0, \\ -(\sigma/z)^k, & z \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (n > k > 3).$$

На малых расстояниях уравнение (25) записывается в форме

$$\frac{d^2 \chi}{dz^2} - 4m\varepsilon \left(\frac{\sigma}{z}\right)^n \chi \approx 0, \quad (z \rightarrow 0).$$

В качестве соответствующего асимптотического решения имеем

$$\chi(z) \approx \sqrt{z} Z_{-1/(n-2)} \left(-i \left(\frac{\sigma_n}{z} \right)^{(n-2)/2} \right),$$

где $Z_\nu(\cdot)$ - цилиндрическая функция, корреляционная длина

$$\sigma_n = \sigma \left[\frac{4}{\Lambda(n-2)} \right]^{2/(n-2)}, \quad \Lambda \equiv (m\varepsilon\sigma^2)^{-1/2},$$

Λ - параметр Де Бюра. Цилиндрическая функция

$$Z_\nu(z) = C_1 J_\nu(z) + C_2 N_\nu(z)$$

является линейной комбинацией функции Бесселя $J_\nu(z)$ и функции Неймана $N_\nu(z)$. Пользуясь асимптотическими свойствами

$$f_{\nu}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\sqrt{z}}{2} - \frac{\pi}{4}\right),$$

$$N_{\nu}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin\left(z - \frac{\sqrt{z}}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (|z| \gg 1)$$

для функции $\chi(z)$ находим ограниченное выражение

$$\chi(z) \approx C z^{n/4} \exp\left[-\left(\frac{x_n}{z}\right)^{(n-2)/2}\right].$$

Для сглаживающей функции (26) получаем

$$z(z) \approx C^2 z^{n/2} \exp\left[-2\left(\frac{x_n}{z}\right)^{(n-2)/2}\right], \quad (z \rightarrow 0). \quad (27)$$

На больших расстояниях, согласно (25), имеем

$$\frac{d^2 \chi}{dz^2} + 4m \varepsilon \left(\frac{\sigma}{z}\right)^k \chi \approx 0, \quad (z \rightarrow \infty).$$

Решение последнего уравнения

$$\chi(z) \approx \sqrt{z} \bar{Z}_{1/(k-2)} \left(-\left(\frac{x_k}{z}\right)^{(k-2)/2}\right)$$

выражается через цилиндрическую функцию

$$\bar{Z}_{\nu}(z) = C_3 f_{\nu}(z) + C_4 f_{-\nu}(z).$$

В соответствии с асимптотикой

$$f_{\nu}(z) \approx \frac{(z/2)^{\nu}}{\Gamma(1+\nu)} \left[1 - \frac{z^2}{4(1+\nu)}\right], \quad (|z| \ll 1),$$

где $\nu \equiv 1/(k-2) < 1$ при $k > 3$, $\Gamma(\cdot)$ - гамма функция, имеем

$$\chi(z) \approx \bar{C} \left[1 - \frac{k-2}{4(k-1)} \left(\frac{x_k}{z}\right)^{k-2}\right].$$

Из условия (22) следует $\bar{C} = 1$. Поэтому для сглаживающей функции (26) получаем

$$\beta(z) \approx 1 - \frac{k-2}{2(k-1)} \left(\frac{x_k}{z} \right)^{k-2}, \quad (z \rightarrow \infty). \quad (28)$$

В теории конденсированных сред часто используется потенциал Леннарда - Джонса

$$\Phi(z) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{z} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^k \right],$$

имеющий минимум

$$\Phi(z_0) = -4\varepsilon \frac{n-k}{n} \left(\frac{k}{n} \right)^{k/(n-k)}$$

в точке

$$z_0 = \sigma \left(\frac{n}{k} \right)^{1/(n-k)},$$

а при $z \ll z_0$ и при $z \gg z_0$ имеющих те же асимптотические свойства, что и рассмотренные выше. Особенно часто встречается потенциал с $n=12$, $k=6$. В этом случае $\Phi(z) = -\varepsilon$, $z_0 = 2^{1/6} \sigma$, а асимптотические выражения (27) и (28) переходят в следующие:

$$\beta(z) \approx C z^6 \exp \left[-2 \left(\frac{x_{12}}{z} \right)^6 \right], \quad (z \ll z_0), \quad (29)$$

$$\beta(z) \approx 1 - \frac{2}{5} \left(\frac{x_6}{z} \right)^4, \quad (z \gg z_0), \quad (30)$$

где

$$x_{12} = \sigma \left(\frac{2}{5\Lambda} \right)^{1/6}, \quad x_6 = \frac{\sigma}{\sqrt{\Lambda}}.$$

Корреляционные длины x_n и x_k существенно зависят от параметра Де Бюра Λ , значения которого сильно варьируются в зависимости от вида вещества. В качестве примера приведем Λ (в скобках) для некоторых веществ:

$$\begin{aligned} & \text{Ne}^3 (0,494), \text{Ne}^4 (0,430), \text{Ne}^6 (0,347), \\ & \text{H} \uparrow (0,740), \text{H} \uparrow (0,523), \text{T} \uparrow (0,428), \\ & \text{Ne} (0,092), \text{Ar} (0,029), \text{Kr} (0,016), \text{Xe} (0,010). \end{aligned}$$

Для всех этих веществ уравнение (25) решалось численно. Расчеты показали, что сглаживающая функция (26) монотонно возрастает при увеличении z .

Как видно из выражений (27) и (28) или (29) и (30), сглаживающая

функция обладает нужными асимптотическими свойствами (22). При этом на малых расстояниях она экспоненциально стремится к нулю, что компенсирует расходимость потенциала. Сглаженный потенциал $\overline{\Phi}(r) = z(r) \Phi(r)$ становится интегрируемым.

Изложенный здесь метод построения сглаживающей корреляционной функции отличается простотой от значительно более громоздких вариационных методов, обзор которых можно найти у Гюйе /17/.

6. Пропагаторное уравнение

После того как найден массовый оператор, являющийся функционалом от одночастичного пропагатора, можно перейти к решению уравнения движения (8). Последнее удобно записать в форме уравнения Дайсона

$$G(12) = G_0(12) + \int \Delta(13) G(32) d(3), \quad (31)$$

в котором

$$\Delta(12) = \int G_0(13) \left[\Sigma(32) - \Sigma_0(32) \right] d(3), \quad (32)$$

$\Sigma_0(12)$ - произвольный массовый оператор, а $G_0(12)$ соответствующий ему пропагатор.

В обычной теории возмущений уравнение (31) решают методом итераций, выбирая за нулевое приближение $\Sigma_0 = 0$, причем G_0 является пропагатором свободных частиц. Однако, когда частицы сильно взаимодействуют между собой, такая процедура не годится. Тогда в качестве нулевого приближения надо взять некоторую решаемую задачу, моделирующую основные физические особенности исследуемой системы. Для улучшения сходимости итерационной последовательности определим функцию

$$R(12) = \frac{G(12)}{G(12) - \int \Delta(13) G(32) d(3)}. \quad (33)$$

При этом (31) принимает вид

$$G(12) = R(12) G_0(12). \quad (34)$$

Итерирование системы уравнений (33) и (34) приводим по схеме

$$G_0 \rightarrow R_1 \rightarrow G_1 \rightarrow R_2 \rightarrow G_2 \rightarrow \dots \quad (35)$$

При осуществлении итерационной процедуры (35) могут появиться расходимости, эквивалентные расходимостям в квантовой теории поля /18/. Поясним причины возникновения этих расходимостей и укажем способы их устранения.

Пропагатор нулевого приближения в случае равновесной системы обычно представляется в виде разложения

$$G_0(12) = \int G_0(\epsilon, t_{12}) \psi_{\epsilon}(\vec{r}_1) \psi_{\epsilon}^*(\vec{r}_2) f(\epsilon) d\epsilon \quad (36)$$

по ортонормированным волновым функциям, образующим полный базис,

$$\int \psi_{\epsilon}^*(\vec{r}) \psi_{\epsilon'}(\vec{r}') f(\epsilon) d\epsilon = \delta(\vec{r}-\vec{r}');$$

в разложении (36)

$$G_0(\epsilon, t) = -i \left\{ \Theta(t) [1 \pm n(\epsilon)] \pm \Theta(-t) n(\epsilon) \right\} e^{-i\epsilon t}, \quad (37)$$

где

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0, \\ 0, & t < 0, \end{cases} \quad n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} \mp 1}, \quad t_{12} = t_1 - t_2,$$

β - обратная температура. Итерирование по схеме (35) приводит к появлению степеней $G_0^m(\epsilon, t)$ при $m = 2, 3, \dots$. Интегралы, содержащие такие степени, расходятся. Появление этих расходимостей вполне объяснимо. Выражение $G_0^m(\epsilon, t)$ представляет собой произведение обобщенных функций с совпадающими особенностями. Если правильно доопределить такие произведения, то расходимости будут устранены. Один способ регуляризации степеней $G_0^m(\epsilon, t)$ состоит в том, чтобы сдвинуть особые точки сомножителей, определяя произведение /7, 19/

$$G_0^m(\epsilon, t) = \lim_{\epsilon_j \rightarrow \epsilon} \prod_{j=1}^m G_0(\epsilon_j, t), \quad (38)$$

причем предельный переход к совпадающим особенностям производится только после интегрирования. Этот способ устранения расходимостей аналогичен регуляризации Паули - Вилларса /18/. Регуляризация с помощью условия (38) приводит к довольно громоздким выкладкам. Было показано /11/, что существует другой способ регуляризации, дающий те же

результаты, что и (38), но гораздо более элегантный; этот второй способ основан на представлении пропагаторной степени выражением

$$G_0^m(\varepsilon, t) = -\frac{i}{(m-1)!} \frac{d^{m-1}}{d\varepsilon^{m-1}} \left\{ \Theta(t) [1 \pm n(\varepsilon)] \pm \Theta(-t) n(\varepsilon) \right\} e^{-i\varepsilon t} \quad (39)$$

Преобразование Фурье

$$\tilde{G}_0(\varepsilon, \omega) = \int G_0(\varepsilon, t) e^{i\omega t} dt$$

для выражения (39) дает

$$\tilde{G}_0^m(\varepsilon, \omega) = \frac{1 \pm n(\omega)}{(\omega - \varepsilon + i0)^m} \mp \frac{n(\omega)}{(\omega - \varepsilon - i0)^m} \quad (40)$$

Формула (40) поясняет, как в нашем случае доопределяется произведение обобщенных функций с совпадающими полюсами.

7. Наблюдаемые величины

Если пропагаторы найдены в каком-то приближении, остается рассчитать наблюдаемые величины, являющиеся средними значениями от соответствующих операторов \hat{A} . Далее будет показано, как можно повысить точность таких расчетов.

Выберем в качестве нулевого приближения для массового оператора функцию, содержащую набор пробных параметров \mathfrak{z} . Тогда нулевой пропагатор G_0 и все последующие пропагаторы G_k будут зависеть от этого набора \mathfrak{z} . Естественно, наблюдаемые величины, вычисляемые с помощью приближенных выражений для пропагаторов, тоже зависят от пробных параметров \mathfrak{z} . Нулевому пропагатору G_0 поставим в соответствие приближенное значение наблюдаемой величины $A_1(\mathfrak{z})$, пропагатору G_1 поставим в соответствие $A_2(\mathfrak{z})$ и так далее: среднее значение наблюдаемой, вычисленное с помощью k раз проитерированного пропагатора G_k , будем обозначать $A_{k+1}(\mathfrak{z})$. Таким образом, получаем последовательность $\{A_k(\mathfrak{z})\}$, состоящую из элементов

$$A_k(\mathfrak{z}) = \langle \hat{A} \rangle_{k-1}, \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (41)$$

Определим непрерывную итерационную процедуру, вводя непрерывную переменную $t \in [1, \infty)$ и функцию $A(t, \mathfrak{z})$ такую, что, когда

переменная t проходит через дискретные точки $t = k$, тогда

$$A(k, z) = A_k(z). \quad (42)$$

Зададим функцию $z(A)$ равенством

$$A_k(z) = A. \quad (43)$$

Наконец, введем функцию

$$\bar{A}(t, A) \equiv A(t, z(A)), \quad (44)$$

обладающую, по определению (43), свойством

$$\bar{A}(1, A) = A. \quad (45)$$

Точность вычисления наблюдаемых величин для сильно взаимодействующих систем удастся значительно повысить, если известны рекуррентные соотношения, связывающие $A_k(z)$ с $A_{k+1}(z)$. Тогда, пользуясь методом ренормализационной группы, можно было бы найти для наблюдаемой величины перенормированное выражение, существенно более близкое к точному по сравнению с приближениями (41) простой итерационной процедуры. Вообще говоря, всякую итерационную процедуру, меняя итерационную схему или нулевую итерацию, можно перестроить бесконечным числом способов. Предположим ^{/20/}, что из бесконечного множества итерационных процедур можно выбрать такую, которая в непрерывном представлении (44) обладает свойством автомодельности

$$\bar{A}(\lambda t, A) = \bar{A}(t, \bar{A}(\lambda, A)). \quad (46)$$

Автомодельное рекуррентное соотношение (46) выбрано потому, что оно приближенно выполняется для любой сходящейся последовательности, у которой первое приближение (43) близко к точному значению ^{/20/}.

Дифференцируя (46) по t и полагая $t \rightarrow 1$, $\lambda \rightarrow t$, получаем дифференциальное уравнение ренормгруппы

$$\frac{\partial \bar{A}(t, A)}{\partial \ln t} = \beta(\bar{A}(t, A)), \quad (47)$$

в котором

$$\beta(A) = \left. \frac{\partial \bar{A}(t, A)}{\partial t} \right|_{t=1} \quad (48)$$

- функция Гелл-Манна - Лоу. Проинтегрировав (47), имеем

$$\int_A^{\bar{A}} \frac{dA'}{\beta(A')} = \rho_n t .$$

Как обычно в методе ренормгруппы, функция Гелл-Манна - Лоу определяется приближенно. В нашем случае непрерывную производную по t следует заменить конечной разностью

$$\frac{\partial \bar{A}(t, A)}{\partial t} \cong \bar{A}([t]+1, A) - \bar{A}([t], A) ,$$

где $[t]$ означает целую часть от t . При этом

$$\left. \frac{\partial \bar{A}(t, A)}{\partial t} \right|_{t=1} \cong A(2, z(A)) - A(1, z(A)) .$$

Функция Гелл-Манна - Лоу (48) принимает вид

$$\beta(A) \cong A_2(z(A)) - A . \quad (49)$$

Поскольку рассматриваемая итерационная процедура предполагается сходящейся, то должна существовать точка насыщения k_* такая, что с любой наперед заданной точностью

$$A_{k_*+1}(z) = A_{k_*}(z) .$$

Соответственно, должна существовать точка t_* , при стремлении к которой переменной t функция $\bar{A}(t, A)$ стремится к величине

$$A_* = \bar{A}(t_*, A) ,$$

не зависящей от $t \geq t_*$. Это означает, что

$$\frac{\partial \bar{A}(t, A)}{\partial t} \rightarrow 0, \quad (t \rightarrow t_*) .$$

Отсюда и из уравнения (47) вытекает, что функция Гелл-Манна - Лоу в фиксированной точке A_* обращается в ноль:

$$\beta(\bar{A}(t_*, A)) = \beta(A_*) = 0.$$

Подставляя сюда представление функции (49), получаем

$$A_2(z_*) = A_1(z_*), \quad z_* \equiv z(A_*). \quad (50)$$

Уравнения типа (50) были предложены в работах /7,8/ и использовались для описания квантовых кристаллов /10-13/. Очевидно, что эти уравнения с равным успехом можно назвать или условиями согласования, или условиями быстрой сходимости, так как они позволяют само-согласованным образом определить пробные параметры z , входящие в нулевое приближение пропагатора G_0 , обеспечивая тем самым быструю сходимость итерационной процедуры для наблюдаемых величин. В конкретных задачах надо составлять уравнения типа (50) для столько-нибудь наблюдаемых величин, сколько пробных параметров необходимо определить.

В настоящей статье показано, что уравнение (50) представляет собой условие на фиксированную точку. Этот факт и объясняет, почему данное условие действительно улучшает сходимость итерационной процедуры.

Я очень признателен профессору П.Цише и коллегам из Технического университета Дрездена за гостеприимство и полезные дискуссии. Я благодарен профессору А.Коулману за обсуждение свойств парной корреляционной функции. Я признателен также Е.П.Кадацовой за вычисление на ЭВМ сглаживающей функции (26) для веществ инертной группы и поляризованных водорода, дейтерия и трития.

Литература

1. Physics of Simple Liquids. Eds. H.N.Temperley, J.S.Rowlinson, G.S.Rushbrooke, North-Holland, Amsterdam, 1968.
2. Kadanoff L., Baym G. - Quantum Statistical Mechanics. Benjamin, New York, 1962.
3. Negele J.W. - Rev.Mod.Phys., 1982, 54, p.913.
4. Abraham F.F. - Phys.Rep., 1979, 53, p.93.
5. Miller M.D. - Ann.Phys., 1980, 127, p.367.
6. Дкалов В.И. - ТМФ, 1973, 17, с.422.
7. Дкалов В.И. - ВМУ, 1976, 17, с.270.

8. Якалов В.И. - ТМФ, 1976, 28, с.92.
9. Якалов В.И. - В кн.: Проблемы квантовой теории поля, с.62, ОИЯИ, Д2-87-798, Дубна, 1987.
10. Yukalov V.I. - Physica, 1977, A89, p.363.
11. Yukalov V.I. - Ann.Physik, 1981, 38, p.419.
12. Yukalov V.I., Zubov V.I. - Forts.Phys., 1983, 31, p.627.
13. Yukalov V.I. - Phys.Rev., 1985, B32, p.436.
14. Kirkwood J.G. - Quantum Statistics and Cooperative Phenomena, Gordon and Breach, New York, 1965.
15. Coleman A.J. - Rev.Mod.Phys., 1963, 35, p.668.
16. Coleman A.J. - J.Math.Phys., 1965, 6, p.1425.
17. Guyer R. - Sol.State Phys., 1969, 23, p.413.
18. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. - Введение в теорию квантованных полей, Наука, Москва, 1973.
19. Yukalov V.I. - Ann.Physik, 1979, 36, p.31.
20. Якалов В.И. - Сообщ. ОИЯИ, П17-88-893, Дубна, 1988.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 марта 1989 года.