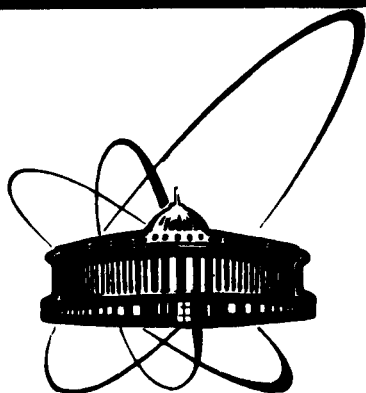


89-316



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

Ю 233

P17-89-316

**В. И. Юкалов**

**НОВАЯ ИТЕРАЦИОННАЯ ПРОЦЕДУРА  
ДЛЯ СИСТЕМ  
С СИНГУЛЯРНЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ**

Направлено в журнал "Physics Letters A"

**1989**

## I. Введение

Потенциалы, описывающие взаимодействие атомов, молекул или иных частиц, часто имеют сингулярный вид. Неинтегрируемые потенциалы называют сильно сингулярными или потенциалами с твердым кором. В качестве примера можно привести потенциалы Леннарда - Джонса и Букингема, широко используемые в физике конденсированных сред<sup>/1/</sup>. В теории ядра также применяются различные потенциалы с твердым кором<sup>/2/</sup>.

В случае сильно сингулярных потенциалов обычная теория возмущений в проблеме многих тел<sup>/3/</sup> неприменима, так как во всех порядках теории возмущений, начиная с приближения Хартри, массовый оператор, или собственная энергия, расходится. Данная ситуация аналогична появлению ультрафиолетовой расходимости в квантовой теории поля<sup>/4/</sup>, где эта расходимость устраняется с помощью ренормировки константы взаимодействия<sup>/4,5/</sup>.

В проблеме многих тел расходимости, связанные с сингулярностью потенциала взаимодействия, тоже можно устранить, учитывая межчастичные короткодействующие корреляции. Основными способами учета этих корреляций являются следующие. 1) Метод эффективного потенциала<sup>/1,2/</sup>: выбирается какое-либо приближение для массового оператора, по форме совпадающее с одним из приближений обычной теории возмущений, однако вместо исходного сингулярного потенциала подставляется феноменологический потенциал без сингулярности, а его параметры определяются из сравнения расчетов, выполненных в данном приближении, с экспериментом. 2) Метод функций Джастрова<sup>/6,7/</sup>: многочастичная волновая функция представляется в виде симметризованных произведений одночастичных волновых функций и парных корреляционных функций, причем последние либо полностью задаются феноменологически, либо их форма постулируется, а параметры определяются из ограниченной вариационной процедуры. 3) Приближение связанных кластеров<sup>/7,8/</sup>: многочастичная волновая функция записывается в форме  $\Psi = \exp(\hat{S}) \Phi$ ,  $\hat{S} = \sum \hat{S}_n$ , где  $\hat{S}_n$  - оператор  $n$ -частичного кластера,  $\Phi$  - слетеровский детерминант одночастичных состояний; при подстановке в уравнение Шредингера  $\exp(\hat{S})$  разлагается в ряд, а в сумме  $\sum \hat{S}_n$  оставляется конечное число слагаемых. 4) Расщепление Кирикуды<sup>/9,10/</sup>: двухчастичная корреляционная функция расщепляется на произведение двух одночастичных распределений и функции, учитывающей короткодействующие корреляции; последняя функция либо задается феноменологически, либо определяется полуфеноменологически с помощью ограниченной вариации. 5) Расщепление трехчастичных функций<sup>/11,12/</sup>: трехчастичная функция Грина или корреляционная функция представляются в виде комбинации одночас-

тичных и двухчастичных функций; для двухчастичной функции Грина получается уравнение типа Бете - Солпитера; аналогичное уравнение для вершинной части называется уравнением Бракнера - Голдстоуна; на диаграммном языке такие приближения называются лестничными, так как соответствуют суммированию лестничных диаграмм.

Все перечисленные подходы представляют собой просто разные варианты метода расщеплений, когда расщепляются либо высшие функции Грина, либо корреляционные функции, либо волновые функции. Процедура расщепления, как известно, не является регулярной, поскольку нахождение поправок к каждому выбранному приближению или совсем не определено, или определено неоднозначно.

В данной статье предлагается новый подход к описанию многочастичных систем с сингулярными потенциалами. Строится регулярная итерационная процедура, позволяющая однозначно находить любые последовательные приближения и не содержащая расходимостей ни на каком шаге.

## 2. Основные обозначения

Для описания многочастичной системы используем гейзенберговское представление полевых операторов  $\psi(x, t)$ , где  $x$  - совокупность пространственных координат и внутренних степеней свободы, например, спина, изоспина и т.д.,  $t$  - время. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \int \psi^\dagger(x, t) \left[ K(x) - \mu(x, t) \right] \psi(x, t) dx + \frac{1}{2} \int \psi^\dagger(x, t) \psi^\dagger(x', t) V(x, x') \psi(x', t) \psi(x, t) dx dx', \quad (I)$$

в котором  $K(x)$  - оператор кинетической энергии,  $\mu(x, t)$  - химический потенциал, включающий в себя внешние поля,  $V(x, x')$  - потенциал двухчастичного взаимодействия, сингулярный на малых расстояниях между частицами:

$$V(x, x') \rightarrow \infty, \quad (|x - x'| \rightarrow 0).$$

В дальнейшем все громоздкие выражения приобретают существенно более элегантный вид при использовании сокращенных обозначений для функций

$$f(12 \dots n) \equiv f(x_1, t_1, x_2, t_2, \dots, x_n, t_n)$$

и дифференциалов

$$d(12 \dots n) \equiv dx, dt, dx_2 dt_2 \dots dx_n dt_n .$$

При этом, например, для химического потенциала и дельта-функции имеем

$$\mu(1) \equiv \mu(x_1, t_1), \quad \delta^I(12) \equiv \delta^I(x_1 - x_2) \delta^I(t_1 - t_2) .$$

Введем также потенциал взаимодействия

$$\nu(12) \equiv \nu(x_1, x_2) \delta^I(t_1 - t_2 + 0) . \quad (2)$$

Определим причинные функции Грина, одночастичный пропагатор

$$G(12) = -i \langle \hat{T} \psi(1) \psi^\dagger(2) \rangle \quad (3)$$

и двухчастичный, бинарный, пропагатор

$$B(1234) = - \langle \hat{T} \psi(1) \psi(2) \psi^\dagger(3) \psi^\dagger(4) \rangle , \quad (4)$$

где константа Планка  $\hbar \equiv 1$ . Уравнение движения можно записать в форме

$$\int G^{-1}(13) G(32) d(3) = \delta^I(12) , \quad (5)$$

в которой обратный пропагатор

$$G^{-1}(12) = \left[ i \frac{\partial}{\partial t_1} - K(1) + \mu(1) \right] \delta^I(12) - \Sigma(12) , \quad (6)$$

массовый оператор, или собственная энергия,  $\Sigma(12)$  задается соотношением

$$\int \Sigma(13) G(32) = \pm i \int \nu(13) B(1332) d(3) .$$

Из последнего имеем

$$\Sigma(12) = \pm i \int \nu(13) B(1334) G^{-1}(42) d(34) . \quad (7)$$

Используя вариационную технику Швингера /14/ для бинарного пропагатора, можно получить /3, II/ вариационное равенство

$$B(1223) = G(13)G(22) \mp \frac{\delta G(13)}{\delta \mu(2)}, \quad (8)$$

здесь

$$G(11) \equiv \lim_{x_1 \rightarrow x_2} \lim_{t_1 \rightarrow t_2 + 0} G(12).$$

Вводя функцию отклика

$$\chi(123) \equiv -\delta^2 G(12) / \delta \mu(3), \quad (9)$$

в качестве вариационного равенства Швингера (8) имеем

$$B(1223) = G(13)G(22) \pm \chi(132). \quad (10)$$

Собственная энергия (7) принимает вид

$$\Sigma(12) = \pm i \delta(12) \int \psi(13) G(33) d(3) + \int \psi(13) \chi(143) G^{-1}(42) d(34).$$

Первое слагаемое в этом выражении соответствует приближению Хартри, которое при сильно сингулярном потенциале  $\psi(12)$  расходится, поэтому теория возмущений, начинающаяся с  $\chi(123) = 0$ , не имеет смысла.

### 3. Удваивающая функция

Подход, предлагаемый в настоящей статье, основан на введении новой функции  $D(123)$ , которую назовем удваивающей и определим равенством

$$B(1223) = s(12) \int D(124) G(43) d(4), \quad (II)$$

в котором  $s(12)$  - сглаживающая функция /10/, учитывающая короткодействующие корреляции. Название удваивающей функции связано с тем, что она, согласно определению (II), превращает одночастичный пропагатор в двухчастичный. Собственная энергия (7) с помощью определения (II) преобразуется к выражению

$$\Sigma(12) = \pm i \int \Phi(13) D(132) d(3), \quad (I2)$$

в котором псевдопотенциал

$$\Phi(12) \equiv \psi(12) s(12) \quad (I3)$$

это сглаженный потенциал, не содержащий расходящейся вследствие того, что исходный сингулярный потенциал  $\Psi(12)$  ренормирован сглаживающей функцией  $\mathcal{S}(12)$ .

Для того чтобы воспользоваться формулой (12), необходимо найти уравнение для удваивающей функции  $D(123)$ . Согласно (10) и (11), устанавливается связь функции отклика с удваивающей функцией

$$\chi(123) = \pm \mathcal{S}(13) \int D(134) G(42) d(4) \mp G(12) G(33). \quad (14)$$

Варьируя уравнение движения (5) по химическому потенциалу и пользуясь вариационными соотношениями

$$\frac{\delta \Sigma(12)}{\delta \mu(3)} = - \int \frac{\delta \Sigma(12)}{\delta G(45)} \chi(453) d(45),$$

$$\frac{\delta G^{-1}(12)}{\delta \mu(3)} = \delta(12) \delta(13) + \int \frac{\delta \Sigma(12)}{\delta G(45)} \chi(453) d(45),$$

получаем уравнение для функции отклика

$$\chi(123) = G(13) G(32) + \int G(14) G(52) \frac{\delta \Sigma(45)}{\delta G(67)} \chi(673) d(4567). \quad (15)$$

Если итерировать уравнение (15), начиная с  $\Sigma(12) = 0$ , то в первом приближении получим функцию отклика, соответствующую приближению Хартри - Фока для бинарного пропагатора (10). Однако это приближение, как подчеркивалось, не имеет смысла из-за расходящейся собственной энергии (?) вследствие сингулярности потенциала  $\Psi(12)$ . Этот факт еще раз показывает необходимость перехода от функции отклика к удваивающей функции, для чего подставим в (15) соотношение (14), что дает

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(12) D(123) &= \delta(13) G(22) \pm G(12) \delta(23) + \\ &+ \int G(14) \frac{\delta \Sigma(43)}{\delta G(56)} \left[ \mathcal{S}(52) \int D(537) G(76) d(7) - G(56) G(32) \right] d(456). \end{aligned} \quad (16)$$

Обозначим

$$D_0(123) = \delta(13) G(22) \pm G(12) \delta(23) \quad (17)$$

и введем оператор  $\hat{X}$ , действие которого на любую трехточечную функцию  $f(123)$  задается равенством

$$\hat{X} f(123) = s(12) f(123) + \\ + \int G(14) \frac{\delta \Sigma(43)}{\delta G(56)} \left[ G(56) G(22) - s(52) \int f(527) G(76) d(7) \right] d(456)$$

Теперь уравнение (16) переписывается в форме

$$\hat{X} D(123) = D_0(123). \quad (18)$$

Определим оператор  $\hat{Y}$  левый обратный к  $\hat{X}$ ,

$$\hat{Y} \hat{X} = 1. \quad (19)$$

Подействовав оператором  $\hat{Y}$  на уравнение (18), имеем

$$D(123) = \hat{Y} D_0(123). \quad (20)$$

Уравнение (20) и представляет собой искомое уравнение для удваивающей функции.

Уравнения (12) и (20) составляют замкнутую систему уравнений относительно собственной энергии и удваивающей функции. Эта система интегральных уравнений с вариационными производными может быть решена с помощью итерационной процедуры, предложенной автором <sup>/15/</sup>.

#### 4. Итерационная процедура

Объединяя (12) и (20), имеем

$$\Sigma(12) = \pm i \int \Phi(13) \hat{Y} D_0(132) d(3). \quad (21)$$

Отсюда очевидно, что построение последовательных приближений для собственной энергии эквивалентно построению таких приближений для оператора  $\hat{Y}$ .

Запишем сначала формальное разложение

$$\hat{Y} = \frac{1}{\hat{X}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\hat{X}_0^{n+1}} (\hat{X} - \hat{X}_0)^n,$$

в котором  $\hat{X}_0$  - произвольный оператор. Этому разложению можно придать более корректную математическую форму, задав оператор  $\hat{Y}_0$ , левый обратный к выбранному  $\hat{X}_0$ ,

$$\hat{Y}_0 \hat{X}_0 = 1. \quad (22)$$

Тогда получаем

$$\hat{Y} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \hat{Y}_0^{n+1} (\hat{X} - \hat{X}_0)^n. \quad (23)$$

В качестве  $\hat{X}_0$  выберем единичный оператор, при этом из (22) следует, что  $\hat{Y}_0$  - также единичный,

$$\hat{X}_0 = 1, \quad \hat{Y}_0 = 1.$$

Поэтому выражение (23) принимает вид

$$\hat{Y} = \sum_{n=0}^{\infty} (1 - \hat{X})^n. \quad (24)$$

Оператор  $\hat{X}$  по определению предыдущего пункта является функционалом  $\hat{X}[\Sigma]$  от собственной энергии. Зададим  $n$ -ое приближение для оператора  $\hat{Y}$  равенством

$$\hat{Y}_n = \sum_{m=0}^n (1 - \hat{X}[\Sigma_n])^m, \quad (\hat{Y}_0 \equiv 1). \quad (25)$$

Итерационная процедура для собственной энергии (21) строится по схеме

$$\hat{Y}_0 \rightarrow \Sigma_1 \rightarrow \hat{Y}_1 \rightarrow \Sigma_2 \rightarrow \dots \quad (26)$$

Таким образом, можно получить любое приближение для собственной энергии, ни одно из которых не содержит расходимостей, так как по построению сингулярный потенциал  $\psi$  (12) всюду входит только в виде ренормированной комбинации (13). Например, в первом приближении

$$\Sigma_1(12) = \pm i \delta(12) \int \Phi(13) G(33) d(3) + i \Phi(12)$$

Беря от (27) вариационную производную,

$$\frac{\delta \Sigma_1(12)}{\delta G(34)} = \pm i \delta(12) \Phi(13) \delta(34)$$



и подставляя в (20)  $\sum_1^A$ , имеем для удваивающей функции

$$\begin{aligned} D_1(123) &= D_0(123) [2 - \xi(12)] \pm \\ &\pm i \int [G(14)G(23)\Phi(43) \pm G(13)G(24)\Phi(34)] G(42) d(4) \pm \\ &\pm i \int [G(13)G(44)\Phi(34) \pm G(14)G(43)\Phi(43)] [3(42) - 1] G(22) d(4). \end{aligned}$$

Во втором приближении для собственной энергии получаем

$$\begin{aligned} \sum_2(12) &= \sum_1(12) + \Delta(12) - \\ &- \int \Phi(13)G(43) [\Phi(42)G(14)G(32) \pm \Phi(24)G(12)G(34)] d(34), \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta(12) &= \pm i \int \Phi(13) D_0(132) [1 - \xi(13)] d(3) + \\ &+ \int \Phi(14)G(44) [1 - \xi(34)] [G(12)G(33)\Phi(23) \pm G(13)G(32)\Phi(32)] d(34). \end{aligned}$$

В заключение остается сказать лишь несколько слов относительно выбора сглаживающей функции  $\xi(I2)$ . Эта функция описывает короткодействующие корреляции и должна удовлетворять асимптотическим условиям

$$\xi(12) \simeq \begin{cases} 0, & \nu(12) \rightarrow \infty, \\ 1, & \nu(12) \rightarrow 0. \end{cases} \quad (29)$$

Этим условиям удовлетворяет, например, выражение

$$\xi(12) = \frac{\langle \psi^\dagger(1)\psi(1)\psi^\dagger(2)\psi(2) \rangle}{\langle \psi^\dagger(1)\psi(1) \rangle \langle \psi^\dagger(2)\psi(2) \rangle} \quad (30)$$

Парную корреляционную функцию, входящую в (30), можно найти с помощью одного из методов учета короткодействующих корреляций, перечисленных во Введении. Таким образом, предлагаемый подход позволяет, стартовав с одного из приближенных расщеплений, последовательно находить к нему поправки любого порядка. Именно эта возможность однозначного определения любых последовательных приближений при заданной сглаживающей функции и представляет собой принципиальное отличие предложенного подхода от метода расщеплений.

### Литература

1. I.F. Silvera, *Rev. Mod. Phys.* 52 (1980) 393.
2. H.A. Bethe, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* 21 (1971) 93.
3. L. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, New York, 1962).
4. Н.Н. Боголюбов, Д.В. Ширков, Введение в теорию квантованных полей. Наука, Москва, 1973 .
5. J.C. Collins, *Renormalization* (Univ. Press, Cambridge, 1984).
6. R. Guyer, *Sol. State Phys.* 23 (1969) 413.
7. J.W. Negele, *Rev. Mod. Phys.* 54 (1982) 913.
8. A.N. Antonov, P.E. Hodgson, I.Z. Petkov, *Nucleon Momentum and Density Distributions in Nuclei* (Clarendon, Oxford, 1988).
9. J.G. Kirkwood, *Quantum Statistics and Cooperative Phenomena* (Gordon and Breach, New York, 1965).
10. V.I. Yukalov, *Phys. Rev.*, B32 (1985) 436.
11. P. Martin, J. Schwinger, *Phys. Rev.*, 115 (1959) 1342.
12. J.M. Ziman, *Elements of Advanced Quantum Theory* (Univ. Press, Cambridge, 1969).
13. В.И. Юкалов, *ВМФ* 17 (1976) 270.
14. J. Schwinger, *Particles, Sources and Fields* (Addison - Wesley, London, 1973).
15. В.И. Юкалов, в кн.: Проблемы квантовой теории поля, с. 62. ОИЯИ Д2-87-798, Дубна, 1987 .

Рукопись поступила в издательский отдел  
5 мая 1989 года.