

## 8.8. МЕТОД ХАРТРИ — ФОКА

Волновая функция системы, состоящей из  $N$  фермионов, должна быть антисимметричной при перестановке любой пары частиц. Это требование можно выполнить, записав волновую функцию в виде детерминанта Слэтера:

$$\Psi = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_1(2) & \dots & u_1(N) \\ u_2(1) & & & \\ \vdots & & & \\ u_N(1) & & & u_N(N) \end{vmatrix}. \quad (8.8.1)$$

Функция  $\Psi$  является суммой членов, каждый из которых — произведение одночастичных функций вида

$$u_i(j) = u_i(\mathbf{r}_j) \chi_i(\sigma_j), \quad (8.8.2)$$

где спинор  $\chi(\sigma)$  равен либо  $\chi_1$  (спин направлен «вверх»), либо  $\chi_2$  (спин направлен «вниз»),

$$\chi_1 \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (8.8.3)$$

Здесь  $\sigma$  — аргумент  $\chi$  в спиновом пространстве, принимающий два значения, 1 или 2. Если  $\chi = \chi_1$ , то  $\chi(1) = 1$ ,  $\chi(2) = 0$ ; соответственно, если  $\chi = \chi_2$ , то  $\chi(1) = 0$ ,  $\chi(2) = 1$ . В отличие от метода Хартри здесь требуется ортогональность волновых функций:

$$\sum_{\sigma_1} \int d^3V_1 u_i^*(1) u_j(1) = \delta_{ij}. \quad (8.8.4)$$

Из вариационного принципа

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (8.8.5)$$

следуют обычные уравнения Хартри — Фока, которые мы не станем выписывать<sup>1)</sup>. Вместо этого подставим в выражение для энергии основного состояния плоские волны, рассматривая их как пробные функции. При вычислении энергии заметим, что функция  $\Psi$  нормирована, так что для всякого оператора вида

$$F = \sum_i f_i \quad (8.8.6)$$

<sup>1)</sup> См. указанную книгу [63], гл. 4; мы используем те же обозначения

( $f_i$  — однофермионный оператор) среднее значение равно

$$\langle \Psi | F | \Psi \rangle = \sum_i \langle i | f | i \rangle, \quad (8.8.7)$$

где  $|i\rangle = u_i$ . Для оператора вида

$$F = \sum_{i < j} g_{ij}, \quad (8.8.8)$$

где  $g_{ij}$  — симметричный двухфермионный оператор, имеем

$$\langle \Psi | F | \Psi \rangle = \sum_{i < j} [\langle ij | g | ij \rangle - \langle ij | g | ji \rangle] = \frac{1}{2} \sum_{i, j} [\langle ij | g | ij \rangle - \langle ij | g | ji \rangle]. \quad (8.8.9)$$

Для данного гамильтониана

$$f_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2, \quad g_{ij} = V_{ij}. \quad (8.8.10)$$

Комбинация членов типа  $f$  и первой части суммы в (8.8.9) (так называемый «прямой» член) равна энергии в методе Хартри, которая была вычислена в разд. 8.7. Кроме того, имеется еще «обменный» член,

$$\begin{aligned} I &= -\frac{1}{2} \sum_{i, j} \langle ij | g | ji \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i, j} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3V_1 d^3V_2 u_i^*(\mathbf{r}_1) u_j^*(\mathbf{r}_2) V_{12} u_i(\mathbf{r}_2) u_j(\mathbf{r}_1) \times \\ &\quad \times \chi_i^*(\sigma_1) \chi_j^*(\sigma_2) \chi_i(\sigma_2) \chi_j(\sigma_1). \end{aligned} \quad (8.8.11)$$

Поскольку

$$\sum_{\sigma} \chi_i^*(\sigma) \chi_j(\sigma) = \delta(m_{s_i}, m_{s_j}), \quad (8.8.12)$$

где  $m_s = \pm 1/2$  — проекция спина на ось  $z$ , то

$$\begin{aligned} I &= -\frac{1}{2} \sum_{i, j} \delta(m_{s_i}, m_{s_j}) \int d^3V_1 d^3V_2 u_i^*(\mathbf{r}_1) u_j^*(\mathbf{r}_2) V_{12} u_i(\mathbf{r}_2) u_j(\mathbf{r}_1) \\ &= -\frac{1}{2} 2 \int d^3V_1 d^3V_2 V_{12} |\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2, \end{aligned} \quad (8.8.13)$$

где по определению

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \sum_{j=1}^N u_j^*(\mathbf{r}_2) u_j(\mathbf{r}_1), \quad (8.8.14)$$

и множитель 2 возникает от двух возможных значений  $m_{si} = m_{sj}$ .

Для плоских волн (8.7.6) получаем

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt[3]{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{12}} d^3k. \quad (8.8.15)$$

Отметим, что здесь нет множителя 2, обусловленного суммированием по спиновым состояниям, так как он уже включен в формулу (8.8.13). Записывая  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{12} = k r_{12} \cos\theta$  и  $d^3k = 2\pi d(\cos\theta) k^2 dk$ , получаем

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{r_{12}^3} (\sin k_F r_{12} - k_F r_{12} \cos k_F r_{12}). \quad (8.8.16)$$

*Упражнение 8.9.* Показать, что  $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = n/2$ , где  $n \equiv k_F^3/3\pi^2$ , и объяснить, почему этот результат представляется разумным.

Подставляя в формулу (8.8.13) выражение (8.6.1) для  $V_{12}$  и обозначая

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_{12}, \end{aligned} \quad (8.8.17)$$

получаем

$$I = \mp g^2 \int d^3R d^3r \rho^2(r) \frac{e^{-\mu r}}{r}. \quad (8.8.18)$$

Интеграл по  $\mathbf{R}$  дает множитель  $\mathcal{V}$ . Интеграл по  $\mathbf{r}$  можно записать в безразмерном виде, вводя новые обозначения

$$x = k_F r, \quad \alpha = \frac{\mu}{k_F}. \quad (8.8.19)$$

При этом

$$I = \mp g^2 \sqrt[3]{\frac{k_F^4}{\pi^3}} I(\alpha), \quad (8.8.20)$$

где

$$I(\alpha) = \int_0^\infty \frac{dx}{x^5} (\sin x - x \cos x)^2 e^{-\alpha x}. \quad (8.8.21)$$

Этот интеграл можно вычислить путем последовательного интегрирования по частям и сведения к табличным интегралам. В результате

$$I(\alpha) = \frac{1}{4} - \frac{\alpha^2}{24} - \frac{\alpha}{3} \operatorname{arctg}\left(\frac{2}{\alpha}\right) + \left(\frac{\alpha^2}{8} + \frac{\alpha^4}{96}\right) \ln\left(1 + \frac{4}{\alpha^2}\right). \quad (8.8.22)$$

Предельные значения равны

$$I(\alpha) \rightarrow \frac{1}{4}, \quad \alpha \rightarrow 0, \quad (8.8.23)$$

$$\rightarrow \frac{1}{9\alpha^2}, \quad \alpha \rightarrow \infty. \quad (8.8.24)$$

*Упражнение 8.10.* Вывести предел (8.8.24), заменяя функцию  $\sin x - x \cos x$  ее значением при малых  $x$ .

Заметим, что параметр  $\alpha$  пропорционален отношению среднего расстояния между частицами к радиусу взаимодействия, поэтому теория возмущений, в рамках которой мы работаем, применима, строго говоря, лишь в пределе  $\alpha \gg 1$ . Таким образом, получается

$$I = \mp g^2 \frac{1}{9\pi^3} \frac{k_F^6}{\mu^2} \zeta_V = \mp g^2 \frac{1}{9\pi^3} \frac{(3\pi^2 n)^2}{\mu^2} \zeta_V = \mp \frac{g^2 \pi n^2 \zeta_V}{\mu^2}. \quad (8.8.25)$$

Это выражение противоположно по знаку «прямому» члену в формуле (8.7.11) и по величине точно равно его половине. Физический смысл этого соотношения в том, что в силу принципа Паули лишь частицы с противоположными спинами могут сблизиться на достаточно малое расстояние и взаимодействовать, так что учет спиновых эффектов понижает энергию взаимодействия в два раза.

Обменный член понижает роль взаимодействий между частицами, уменьшая энергию отталкивания и увеличивая энергию притяжения. Поэтому обменный член дает эффективное притяжение ( $\epsilon_{\text{exch}} < 0$ ) для сил отталкивания и эффективное отталкивание ( $\epsilon_{\text{exch}} > 0$ ) для сил притяжения. Поскольку  $\rho \equiv \epsilon/c^2$ , в пределе  $\alpha \gg 1$  получаем

$$\rho = nm + \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{mc^2} n^{5/3} \pm \frac{\pi n^2 g^2}{\mu^2 c^2}, \quad (8.8.26)$$

$$P = Kn^{5/3} \pm \frac{\pi n^2 g^2}{\mu^2}. \quad (8.8.27)$$

Итак, мы вывели уравнение состояния для потенциала типа Юкавы в приближении Хартри — Фока.

*Упражнение 8.11.* В пределе  $\alpha \ll 1$  потенциал Юкавы переходит в кулоновский потенциал. Используя результаты, полученные в этом разделе, найдите обменную поправку к уравнению состояния холодного нерелятивистского газа электронов (см. разд. 2.4 и работу Солпитера [496]).

### 8.9. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

Изложенный в предыдущем разделе метод Хартри — Фока не позволяет надлежащим образом учесть корреляции между нуклонами. Двухчастичные корреляции можно включить в многочастичную волновую функцию, записав ее в виде

$$\Psi = F\Phi, \quad (8.9.1)$$

где  $\Phi$  — детерминант Слэтера, построенный из волновых функций, отвечающих плоским волнам, как в формуле (8.8.1), а  $F$  — симметризованное произведение двухчастичных корреляционных функций:

$$F = \prod_{i < j} f_{ij}. \quad (8.9.2)$$

Таким образом, волновая функция записывается в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = A \prod_{i < j} f_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \prod_m \phi_m(\mathbf{r}_m), \quad (8.9.3)$$

где  $A$  — оператор антисимметризации, действующий на спины, изоспины и координаты, а  $\phi_m$  — волновые функции плоских волн с учетом спинов и изоспинов:

$$\phi_m(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}^{1/2}} e^{i\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r}} \chi(\sigma_m) \omega(\tau_m) \quad (8.9.4)$$

Волновая функция вида (8.9.3) называется *пробной функцией Джастроу*, она может быть использована для вариационного вычисления энергии основного состояния системы. Множители  $f_{ij}$  отражают препятствие сближению пар частиц на малые расстояния при наличии отталкивательного кора и потому выбираются таким образом, что равны единице на больших расстояниях и падают почти до нуля, когда величина  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  становится порядка радиуса кора  $r_c$ . Дополнительные корреляции могут возникнуть от других компонент силы, действующей между частицами (например, тензорных членов).

Общий метод вариационного расчета состоит в определении минимума среднего значения гамильтониана при варьировании функций  $f$ :

$$\delta \langle H \rangle = 0, \quad \text{где} \quad \langle H \rangle = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (8.9.5)$$