

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

О вариационных пробных функциях
в обобщённом методе Томаса – Ферми

А.Ю. Потехин, А.И. Чугунов, Н.Н. Щечилин, Н. Шамель

Параметризованные распределения плотности нуклонов широко используются в расчётах свойств атомных ядер и плотной неоднородной ядерной материи в компактных звёздах на основе метода Томаса – Ферми и его обобщений. Показано, что использование недостаточно гладких параметризаций может ограничить точность этого метода. Условия гладкости обсуждаются и поясняются на примере так называемой ядерной пасты в мантии нейтронной звезды.

Ключевые слова: сверхплотное вещество, кора нейтронных звёзд, модель Томаса – Ферми, уравнение состояния и фазовое равновесие

PACS numbers: 26.60.–c, 26.60.Gj, 31.15.bt, 64.10.+h

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.11.039804>

Содержание

1. Введение (738).
 2. Плотность энергии в обобщённой теории Томаса – Ферми (740).
 3. Параметризации распределений плотности нуклонов (741).
 4. Расходимости при негладких параметризациях (743).
 - 4.1. Симметричные параметризации в фазах типа "пасты".
 - 4.2. Непрерывность при пересечении поверхности.
 5. Предел точности для негладких параметризаций (744).
 6. Выводы (745).
- Список литературы (745).

1. Введение

Томас [1] и Ферми [2] предложили статистическое описание атома с большим числом электронов. Для вычисления потенциальной энергии и химического потенциала электрона в самосогласованном поле других электронов и ядра они использовали локальную (объёмную) плотность числа электронов. Впоследствии метод Томаса – Ферми (ТФ) усовершенствовался при помощи различных поправок и применялся к изучению самых разнообразных многочастичных систем и плотного вещества (см., например, обзоры [3–6]). В данной работе внимание будет сконцентрировано на обобщённой теории Томаса – Ферми (ОТФ), отличительной осо-

бенностью которой является использование так называемых градиентных поправок, являющихся функциями производных от плотности по координатам.

Первое обобщение модели Томаса – Ферми было предложено Вайцеккером [7] для описания тяжёлых атомных ядер. Он ввёл градиентную поправку к кинетической энергии системы нуклонов, чтобы иметь возможность учитывать влияние поверхности на энергию связи ядра. Компанеец и Павловский [8] показали, что в действительности ведущая квантовая поправка к модели ТФ равна $1/9$ от градиентной поправки Вайцеккера. Киржниц [9] ввёл последовательный пертурбативный метод для вывода квантовых поправок по степеням оператора градиента ∇ от эффективного потенциала. Отметим, что в таком подходе появляются квантовые поправки как к энергии E , так и к плотности числа частиц n . Ходжес [10] представил вывод Киржница более простым способом, впервые получил правильный явный вид поправок четвёртой степени по ∇ и показал, что квантовые поправки к плотности можно исключить из явного рассмотрения, переписав итоговое выражение для энергии через оператор ∇ , применяемый к плотности числа частиц (см. также [11, 12]).

Градиентные поправки можно вывести из разложения матрицы плотности Блоха по степеням приведённой постоянной Планка \hbar методом Вигнера – Кирквуда (см., например, [4, 5]). Члены низшего порядка в модели ОТФ воспроизводят выражения ТФ, а в дальнейшем разложение входят только чётные степени \hbar . Поправки низшего порядка ($\propto \hbar^2$) включают слагаемые с $(\nabla n)^2$ и $\nabla^2 n$. Переходя к следующему порядку разложения, \hbar^4 , получаем следующую поправку, содержащую производные от n вплоть до четвёртой степени.

Другие усовершенствования модели ТФ, помимо градиентных поправок, включают оболочечные поправки, корреляционные и обменные эффекты [3, 5, 6], а также поправки на силы спаривания нуклонов для описания

А.Ю. Потехин^{(1,*), А.И. Чугунов^{(1), Н.Н. Щечилин^{(2), Н. Шамель⁽²⁾}}}

⁽¹⁾ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Политехническая ул. 26, 194021 Санкт-Петербург, Российская Федерация

⁽²⁾ Institut d'Astronomie et d'Astrophysique, CP-226, Université Libre de Bruxelles, 1050 Brussels, Belgium
E-mail: ^(*) palex@astro.ioffe.ru

Статья поступила 27 июня 2024 г.,
после доработки 7 ноября 2024 г.

многоуклонных систем [13]. В этом контексте Брэк и др. [12, 14] развили теорию, именуемую T -ОТФ, которая обобщает модель ОТФ на случай конечных температур T .

Об описании многоуклонных систем стоит сказать более подробно. В отличие от плазмы, состоящей из электронов и атомных ядер, которые при лабораторных условиях можно рассматривать как точечные частицы, взаимодействующие по закону Кулона, в многоуклонных системах основную роль играют сильные взаимодействия между нуклонами, обладающими конечными размерами и состоящими из кварков. В плазме, как правило, применимо приближение Борна – Оппенгеймера, когда при расчёте динамики электронов пренебрегают движением атомных ядер, а в многоуклонных системах протоны и нейтроны выступают как два равноправных сорта частиц. Более того, для корректного описания свойств сравнительно лёгких ядер приходится к двухчастичному потенциалу взаимодействия, определяемому из экспериментов по рассеянию нуклонов, добавлять трёхчастичный потенциал [15–17]. Для теоретического описания свойств более тяжёлых атомных ядер и плотного вещества, как правило, применяются методы самосогласованного поля с феноменологическими *эффективными* потенциалами двухчастичных нуклон-нуклонных взаимодействий, сконструированными таким образом, чтобы имитировать также и многочастичные эффекты (см. обзор [18]). Эффективные потенциалы, позволяющие воспроизвести свойства атомных ядер, имеют сложный вид. Известный класс таких потенциалов — это потенциал Скирма [19] и его модификации (например, [20]). Уравнения Хартри – Фока для сферических ядер со взаимодействием Скирма были впервые выведены в работе [21]. Они имеют вид уравнений Шрёдингера для одночастичных волновых функций, в которые входят *эффективные массы* нуклонов M^* и самосогласованные потенциалы, зависящие от плотности числа частиц, плотности кинетической энергии и спин-орбитальной плотности.

В плотном веществе нуклоны могут образовывать куперовские пары и становиться сверхтекучими. Наиболее точный метод самосогласованного поля для такого вещества — метод Хартри – Фока – Боголюбова (ХФБ; см. обзоры [4, 18] и приведённые там ссылки). Его удаётся применять для описания тяжёлых атомных ядер (в том числе нейтронно-избыточных ядер во внешней коре нейтронных звёзд). Однако если ядра, а точнее — нуклонные кластеры, внедрены в сильно вырожденное нейтронное вещество (например, во внутренней коре нейтронных звёзд), то метод ХФБ становится слишком затратным. В таком случае метод ХФБ можно с хорошей точностью аппроксимировать, используя намного более быстрый в вычислительном плане метод ОТФ, согласованным образом добавляя оболочечные поправки и поправки на куперовское спаривание методом возмущений после выполнения расчёта ОТФ [22–25] (см. подробное сравнение этого метода с методом ХФБ в работе [26]).

Бете [27] развил полуфеноменологическую теорию ТФ для атомных ядер, включающую градиентную поправку второго порядка с эмпирически подбираемым коэффициентом (в статье [27] также даны основные ссылки на предшествующие модели). Брэк и др. [28] обнаружили, что метод ОТФ четвёртого порядка не

требует такого эмпирического подбора, чтобы воспроизвести энергии связи ядер с точностью до нескольких МэВ, тогда как в том случае, когда учитывались только поправки второго порядка, неточность достигала десятков МэВ. Современная теория ОТФ, которая опирается на тщательно откалиброванные эффективные потенциалы нуклон-нуклонного взаимодействия, а также включает оболочечные поправки Струтинского [29, 30] и поправки на спаривание нуклонов, позволяет воспроизвести все измеренные энергии связи тяжёлых ядер с характерными невязками $\sim 0,7$ МэВ (например, [31]; см. обзор [18] и приведённые там ссылки).

В дальнейшем мы рассмотрим применение модели ОТФ к экзотическим состояниям плотного вещества, в которых нуклонные кластеры не обязательно квазисферичны, а могут принимать форму цилиндров (так называемая фаза "спагетти") и пластин (фаза "лазанья") [32, 33]. Вдобавок к этим фазам "ядерной пасты", состоящим из ядерных кластеров на менее плотном фоне свободных нуклонов (главным образом нейтронов) и электронов, в плотном веществе могут также существовать "инверсные" фазы ядерной пасты с локальными понижениями плотности нуклонов [34], называемые "антиспагетти" или "букатини" (инвертированные цилиндры) и "швейцарский сыр" (инвертированные шары) [35–37]. Фазовые состояния ядерной пасты могут соответствовать термодинамическому равновесию (основному состоянию) при средних плотностях числа нуклонов $\bar{n} \sim 0,05–0,08$ фм $^{-3}$. Слои ядерной пасты называют мантий; они располагаются между твёрдой корой и жидким ядром нейтронной звезды (см., например, [35, 36] и приведённые там ссылки). Как показано в статье [38], по своим упругим свойствам мантия близка к жидким кристаллам (современное состояние теории упругости мантии представлено в статьях [39–41]).

Плотность мантии всего в 2–3 раза ниже плотности насыщения симметричной ядерной материи n_{sat} , которая в модели однородного вещества соответствует нулевому давлению и близка к типичной плотности числа нуклонов в тяжёлых атомных ядрах¹.

Модель ТФ и её усовершенствованные версии часто используют в сочетании с приближением Вигнера – Зейтца [46, 47], сводя задачу к рассмотрению одной ячейки Вигнера – Зейтца (ВЗ), которая заменяется нейтральным шаром с тем же объёмом, что и истинная ячейка ВЗ (см. обсуждение ограничений, присущих этому приближению, в статье [48]). Аналогично, для фазы с цилиндрическими ядрами рассматривают в целом нейтральный цилиндр. В случае пластинчатых ядер истинная ячейка ВЗ представляет собой плоскопараллельный слой, так что дополнительное геометрическое упрощение не требуется.

Основное состояние плотной материи отвечает минимуму энергии $E = \int_V \mathcal{E} dV$ для заданного числа нуклонов $N \equiv \int_V (n_p + n_n) dV$ в объёме V при условии зарядовой нейтральности $\int_V (n_p - n_e) dV = 0$, где n_e , n_p и n_n — локальные плотности числа электронов, протонов и нейтронов соответственно, а \mathcal{E} — плотность

¹ Оценки плотности насыщения варьируются от 0,14 фм $^{-3}$ [4] до 0,17 фм $^{-3}$ [42, 43]. Чаще всего приводят значение $n_{\text{sat}} = 0,16$ фм $^{-3}$, основанное на исследовании Тондэра и др. [44]. Недавние экспериментальные результаты показали, что $n_{\text{sat}} = 0,15 \pm 0,01$ фм $^{-3}$ [45].

энергии, которую принято представлять в виде разложения

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{nuc}} + \mathcal{E}_e + \mathcal{E}_{\text{Coul}} + \mathcal{E}_{\text{cor}}. \quad (1)$$

Здесь \mathcal{E}_{nuc} и \mathcal{E}_e — соответственно вклады нуклонов и электронов, $\mathcal{E}_{\text{Coul}}$ — плотность энергии кулоновских взаимодействий (помимо уже включённых в \mathcal{E}_{nuc} и \mathcal{E}_e), а \mathcal{E}_{cor} — различные поправки, которые могут появиться в усовершенствованной теории, такие как оболочечные поправки и поправки на спаривание нуклонов. Плотность ядерной энергии \mathcal{E}_{nuc} в нерелятивистском приближении можно записать в виде (например, [49])

$$\mathcal{E}_{\text{nuc}} = \sum_q \frac{\hbar^2}{2M_q^*} \tau_q + \mathcal{V}, \quad (2)$$

где M_q^* — эффективная масса нуклонов типа q , зависящая от плотности ($q = n$ для нейтронов и $q = p$ для протонов), τ_q — нормированная кинетическая энергия нуклона, порождаемая оператором квадрата импульса в гамильтониане, а \mathcal{V} — сумма потенциальных слагаемых. В рамках ОТФ оба члена в (2) зависят от локальных плотностей числа частиц $n_q(\mathbf{r})$, их градиентов $\nabla n_q(\mathbf{r})$ и спин-орбитальных плотностей $\mathbf{J}_q(\mathbf{r})$ с коэффициентами, определяемыми используемой реализацией потенциала типа Сфирма. Градиентное разложение позволяет выразить $\tau_q(\mathbf{r})$ и $\mathbf{J}_q(\mathbf{r})$ (а значит, и \mathcal{E}_{nuc}) как функции, зависящие только от нуклонных плотностей $n_q(\mathbf{r})$ и их производных [49].

Минимум энергии можно найти путём решения соответствующих уравнений Эйлера – Лагранжа (ЭЛ). Например, Баркат и др. [50] численно решали уравнения ЭЛ, вытекающие из полупеноменологической теории Бете [27]. Позже разные авторы решали уравнения ЭЛ для моделирования конечных ядер [51–53] и ядерной материи [51, 54, 55], применяя так называемый метод мнимого временного шага [56]. Однако ОТФ четвёртого порядка, используемая в сочетании с силами Сфирма (см., например, статью [18] и ссылки там), приводит к сложным, сильно нелинейным уравнениям ЭЛ для плотностей частиц, с трудом поддающимся точному решению [53, 57]. Чтобы избежать этих усложнений и ускорить расчёты, функционал энергии в ОТФ чаще всего минимизируют непосредственно на семействе параметризованных профилей плотности $n_n(\mathbf{r})$ и $n_p(\mathbf{r})$ (примеры будут приведены ниже). Такой *ограниченный вариационный метод* кардинально упрощает и ускоряет расчёты.

Метод ОТФ подвержен разного рода расходимостям. Поскольку градиентные поправки основаны на разложении по степеням \hbar вокруг классических значений, их можно вычислить только внутри классически разрешённой области движения частиц. В случаях конечных или полубесконечных квазиклассических орбит квазиклассические разложения плотности числа частиц $n(\mathbf{r})$ и кинетической энергии $\tau(\mathbf{r})$ не определены в классических точках поворота и за ними, а вблизи таких точек они расходятся. Однако это не представляет проблемы, поскольку подобные расходимости интегрируемы и допускают получение сходящихся выражений для градиентных поправок к τ как функций n и её градиентов [11, 12, 49]. Таким образом, плотности числа частиц в модели ОТФ можно рассматривать как обобщённые функции с хорошо определёнными интегралами и моментами [4, 12]. Интересно также отметить, что ненулевая температура в

модели T -ОТФ устраняет расходимости плотностей в ОТФ и допускает их распространение в классически запрещённые области [14].

Другие расходимости относятся к асимптотической природе градиентного разложения. Градиентные поправки шестого и более высоких порядков расходятся для плотностей, которые экспоненциально спадают на больших расстояниях, и потому они должны быть отброшены [12, 14], по крайней мере при расчётах свойств изолированных атомов и ядер. Таким образом, сходящуюся часть разложения ОТФ составляют только члены до четвёртого порядка включительно.

Однако и эта часть всё ещё может расходиться в рамках ограниченного вариационного метода, если пробные распределения плотности $n_q(\mathbf{r})$ недостаточно гладкие. Цель настоящей работы — пояснить условия гладкости для приложения данного метода к теории ОТФ четвёртого порядка в сферических, цилиндрических и плоскопараллельных ячейках ВЗ.

В разделе 2 мы напомним основные выражения ОТФ для кинетической энергии нуклонов. В разделе 3 будет дан обзор наиболее часто используемых параметризаций локальной плотности нуклонов, применявшихся в вариационных расчётах атомных ядер и неоднородной плотной материи в коре и мантии нейтронных звёзд. В разделе 4 будут обсуждаться расходимости функционалов энергии в модели ОТФ для разных видов изломов параметризованных распределений плотности. В разделе 5 дан вывод соответствующего предела точности для вычислений ОТФ на дискретных сетках. В разделе 6 суммируются выводы.

2. Плотность энергии в обобщённой теории Томаса – Ферми

Ядерную энергию в объёме V даёт интеграл

$$E_{\text{nuc}} = \int_V \mathcal{E}_{\text{nuc}} dV, \quad (3)$$

в котором \mathcal{E}_{nuc} представлена выражением (2). Вклад кинетической энергии в (3) можно записать как

$$\mathcal{T}_q = \int_V \frac{\hbar^2}{2M_q^*} \tau_q dV, \quad \tau_q = \tau_q^{(0)} + \tau_q^{(2)} + \tau_q^{(4)}, \quad (4)$$

где $\tau_q^{(0)}$ — вклад ТФ, а $\tau_q^{(2)}$ и $\tau_q^{(4)}$ — градиентные поправки второго и четвёртого порядков соответственно.

Для простоты пренебрежём отличием эффективной массы M_q^* от массы изолированного нуклона M_q и опустим спин-орбитальные слагаемые. Тогда в пределе нулевой температуры [11, 28]

$$\tau_q^{(0)} = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} n_q^{5/3}, \quad (5)$$

$$\tau_q^{(2)} = \frac{1}{3} \nabla^2 n_q + \frac{1}{36} \frac{(\nabla n_q)^2}{n_q}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \tau_q^{(4)} = & \frac{n_q^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}} \left\{ \frac{1}{180} \frac{\nabla^4 n_q}{n_q} - \frac{1}{72} \frac{\nabla n_q \nabla(\nabla^2 n_q)}{n_q^2} - \right. \\ & - \frac{7}{1080} \frac{(\nabla^2 n_q)^2}{n_q^2} - \frac{7}{2160} \frac{\nabla^2(\nabla n_q)^2}{n_q^2} + \frac{7}{324} \frac{(\nabla n_q)^2 \nabla^2 n_q}{n_q^3} + \\ & \left. + \frac{23}{810} \frac{(\nabla n_q \nabla)^2 n_q}{n_q^3} - \frac{1}{45} \frac{(\nabla n_q)^4}{n_q^4} \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

Четвёртые и третьи производные от $n_q(\mathbf{r})$ можно устранить из $E_{\text{нук}}$ при помощи интегрирования по частям с использованием теоремы Остроградского – Гаусса [10, 12]. Например, второе слагаемое в (7) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_V \phi \nabla n_q \nabla (\nabla^2 n_q) dV &= \int_V \left\{ \nabla [(\phi \nabla^2 n_q) \nabla n_q] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{d\phi}{dn_q} (\nabla n_q)^2 \nabla^2 n_q - \phi (\nabla^2 n_q)^2 \right\} dV = \\ &= \oint_S (\phi \nabla^2 n_q) \nabla n_q \mathbf{n} dS - \\ &\quad - \int_V \left[\frac{d\phi}{dn_q} (\nabla n_q)^2 \nabla^2 n_q + \phi (\nabla^2 n_q)^2 \right] dV, \end{aligned} \quad (8)$$

где \mathbf{n} — внешняя нормаль к поверхности S рассматриваемого объёма V , и мы для краткости обозначили $\phi \equiv -(1/72)(3\pi^2)^{-2/3} n_q^{-5/3}$. Этот метод даёт

$$\mathcal{T}_q^{(4)} \equiv \frac{\hbar^2}{2M_q} \int_V \tau_q^{(4)}(\mathbf{r}) dV = \mathcal{T}_{q,v}^{(4)} + \mathcal{T}_{q,s}^{(4)}, \quad (9)$$

где $\mathcal{T}_{q,v}^{(4)}$ и $\mathcal{T}_{q,s}^{(4)}$ можно представить в виде

$$\mathcal{T}_{q,v}^{(4)} \equiv \frac{\hbar^2}{2M_q} \int_V \tau_{q,v}^{(4)}(\mathbf{r}) dV, \quad \mathcal{T}_{q,s}^{(4)} \equiv \frac{\hbar^2}{2M_q} \oint_S \tau_{q,s}^{(4)}(\mathbf{r}) dS, \quad (10)$$

причём $\tau_{q,v}^{(4)}(\mathbf{r})$ включает только производные первого и второго порядка от плотности. В явном виде [49]

$$\begin{aligned} \tau_{q,v}^{(4)} &= \frac{n_q^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}} \left\{ \frac{1}{270} \left(\frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \right)^2 - \frac{1}{240} \frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \left(\frac{\nabla n_q}{n_q} \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{810} \left(\frac{\nabla n_q}{n_q} \right)^4 \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

что эквивалентно формуле (30) в работе Ходжеса [10]. Обычно предполагают $\mathcal{T}_{q,s}^{(4)} = 0$, так что $\tau_q^{(4)}$ в формуле (4) можно заменить на $\tau_{q,v}^{(4)}$. Для этого Ходжес [10] и Брэк с соавторами [12] производили интегрирование по всему пространству, в контексте изолированного атомного ядра в вакууме рассматривая функции $n_q(\mathbf{r})$, стремящиеся к нулю при $r \rightarrow \infty$ вместе со своими производными. В приближении ВЗ интеграл по поверхности $\mathcal{T}_{q,s}^{(4)}$ можно опустить, например, при условии, что производная от плотности вдоль направления, перпендикулярного к поверхности S ячейки ВЗ, равна нулю²:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla n_q(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r} \in S} = 0. \quad (12)$$

Вигнер и Зейтц [46] использовали аналогичное граничное условие для электронных волновых функций. Оно естественным образом вытекает из симметрии и периодичности $n_q(\mathbf{r})$ в предположении о непрерывности ∇n_q .

Ранее непрерывность ∇n_q была показана для таких распределений плотности, которые обеспечивают точный минимум $E_{\text{нук}}$ при решении полной вариационной

задачи методом Эйлера – Лагранжа [50]. В данной работе мы покажем, что такая же непрерывность может потребоваться для параметризованных распределений плотности нуклонов в рамках ограниченного вариационного подхода, чтобы обеспечить сходимость интеграла по объёму в формуле (3).

3. Параметризации распределений плотности нуклонов

Когда вещество сжато настолько сильно, что средняя плотность числа нуклонов $\bar{n} \equiv N/V$ превышает плотность $n_{\text{drip}} \sim (2-3) \times 10^{-4} \text{ фм}^{-3}$, начинается "просачивание нейтронов" (англ. "neutron drip") из ядер. Такие гигантские плотности существуют во внутренней коре нейтронных звёзд, где ядра погружены в "море" свободных нейтронов. В настоящее время одним из самых детальных и удобных методов описания такого плотного вещества является ОТФ с оболочечными поправками для протонов (которые остаются связанными внутри ядер) и поправками на спаривание нуклонов.

Мы рассмотрим ячейки ВЗ в форме шаров, цилиндров и пластин, предполагая, что плотность n_q симметрична по отношению к поворотам вокруг центра шара или оси цилиндра либо к отражению относительно центральной плоскости пластины. Это означает, что n_q зависит только от радиальной координаты r или r_{\perp} в первом и втором случае соответственно и только от $|z|$ в третьем случае, где z — координата, измеряемая вдоль нормали от центральной плоскости ячейки. Фазы со сферической, цилиндрической и плоскопараллельной симметрией часто называют трёхмерными, двумерными и одномерными (3D, 2D и 1D) структурами соответственно. Однако следует иметь в виду, что данные обозначения относятся только к типу симметрии распределения плотности, тогда как движение частиц (электронов и нуклонов) остаётся трёхмерным. Такие "2D"- и "1D"-структуры не следует путать с истинными 2D- и 1D-системами, которые рассматривались, например в статье [6]: они описываются уравнениями ОТФ, отличающимися от формул (5)–(7) и (11).

Симметричную параметризацию распределения плотности в ячейке ВЗ удобно записать в виде

$$n_q(\xi) = n_q^{\text{out}} + n_{\Lambda q} \hat{f}_q(\xi), \quad (13)$$

$$\hat{f}_q(\xi) \equiv \frac{f_q(\xi) - f_q(R)}{f_q(0) - f_q(R)}, \quad (14)$$

где ξ — радиальная координата для сферической или цилиндрической ячейки радиуса R или расстояние от центральной плоскости плоскопараллельной ячейки, имеющей толщину $2R$ ($\xi = r, r_{\perp}$ или $|z|$ для трёх соответствующих случаев). Функция $f_q(\xi)$ описывает форму профиля плотности, которая может зависеть от подбираемых параметров, а $\hat{f}_q(\xi)$ — профиль плотности, нормированный таким образом, что параметр n_q^{out} имеет смысл плотности нуклонов вне "ядер" (нуклонных кластеров), а точнее — на границе ячейки. Во внутренней коре свободные протоны обычно отсутствуют, и нуклоны образуют кластеры вблизи центра ячейки ВЗ; в этом случае $n_p^{\text{out}} = 0$. Однако свободные протоны могут появиться вблизи границы с ядром звезды [58]. Мы предполагаем, что $f_q(0) > f_q(R) \geq 0$, в

² Например, Онси и др. [49] подчёркивали: "Надо заметить, что выражения четвёртого порядка справедливы только при интегрировании по всему пространству или, вообще говоря, по области, на границе которой градиенты плотности обращаются в ноль".

то время как $n_{\Lambda q}$ может быть положительным для нормальных фаз или отрицательным для инверсных фаз. Соответственно, если n_q^{cen} — плотность в центре ячейки, то $n_{\Lambda q} = n_q^{\text{cen}} - n_q^{\text{out}}$ — избыток плотности числа частиц в центре. Далее мы будем сокращённо обозначать различные параметризации $f_q(\xi)$ верхними индексами.

Оймацу [59] исследовал форму ядер в мантии нейтронной звезды, используя теорию Бете [27] и предполагая, что распределения плотности числа протонов и нейтронов имеют вид

$$f_q^{\text{O}}(\xi) = \begin{cases} \left[1 - \left(\frac{\xi}{r_q}\right)^{t_q}\right]^3, & \xi < r_q, \\ 0, & \xi \geq r_q. \end{cases} \quad (15)$$

Аналогичную параметризацию, но с $t_n = t_p$, $r_n = r_p$ и с показателем степени 2 вместо 3 ранее вводил Арпонен [60]. Параметры t_q определяют резкость профиля локальной плотности, тогда как r_q определяют нейтронный и протонный радиусы ядра ($0 < r_q < R$). В данном случае $\hat{f}_q^{\text{O}}(\xi) = f_q^{\text{O}}(\xi)$. С увеличением плотности \bar{n} профили сглаживаются, приближаясь к пределу однородной ядерной материи, а значит, параметры t_q уменьшаются.

Параметризация (15) широко использовалась в расчётах методами ТФ и ОТФ второго порядка [61–64]. Однако реальные распределения плотности нейтронов и протонов в коре нейтронной звезды не обрезаются на определённом расстоянии от центра ячейки ВЗ. Следовательно, r_n и r_p можно трактовать только как удобные подгоночные параметры. Вблизи дна коры локальное распределение плотности довольно гладкое, и граница между свободными и связанными нейтронами становится достаточно неопределённой. Ещё важнее то, что эта параметризация приводит к расходимости энергии для ОТФ четвертого порядка.

В ряде приложений методов ОТФ к конечным ядрам (с $n_q^{\text{out}} = 0$; например, [65]) и мантии нейтронных звёзд (например, [49, 66]) применялась параметризация в виде простой функции Ферми (известная также как форма Вудса–Саксона [61, 67]), которую можно записать как

$$f_q^{\text{F}}(\xi) = \frac{1}{1 + \exp[(\xi - r_q)/a_q]}, \quad (16)$$

где r_q — радиус ядра на половине высоты, а a_q учитывает размытость поверхности ядра. Эта параметризация подвергалась критике на том основании, что она не улавливает асимметрию профиля плотности нуклонов на границе ядра [54]. Чтобы преодолеть данное ограничение, в ряде расчётов по методу ОТФ применялась модификация формулы (16) [68–71]:

$$f_q^{\text{MF}}(\xi) = \frac{1}{\{1 + \exp[(\xi - r_q)/a_q]\}^{v_q}}, \quad (17)$$

где показатель степени v_q является дополнительным подгоночным параметром. Ещё более общая модификация, допускающая добавочное увеличение или уменьшение плотности нуклонов в центре ячейки, рассматривалась в работах [12, 72], но оказалось, что минимизированная энергия нечувствительна к такой дополнительной степени свободы. Причём увеличение показателя степени v_q от 1 до 3 уменьшает вычисленную энергию тяжёлых ядер на ~ 8 МэВ [72], хотя и не приводит к существенному

изменению результатов для внутренней коры и мантии нейтронной звезды [71].

Легко видеть, что ни f_q^{F} , ни f_q^{MF} не дают пробных функций $n_q(\mathbf{r})$, удовлетворяющих условию (12). Ниже мы рассмотрим другие модификации параметризации типа функции Ферми (16), которые можно записать в общем виде как

$$f_q(\xi) = \frac{1}{1 + h(\xi; r_q, a_q) \exp[(\xi - r_q)/a_q]}. \quad (18)$$

Первый пример такой параметризации с

$$h^{\text{DF}}(\xi; r_q, a_q) = \exp\left[\left(\frac{r_q - R}{\xi - R}\right)^2 - 1\right] \quad (19)$$

ввели Онси и др. [22]. Результирующая "демпфированная параметризация Ферми" $f_q^{\text{DF}}(\xi)$, у которой *все* производные обращаются в нуль при $\xi = R$, последовательно использовалась брюссельско-монреальской исследовательской группой для пробных профилей плотности при расчётах свойств внутренней коры и мантии нейтронных звёзд (например, [73] и приведённые там ссылки).

Профили плотности $n_q(\mathbf{r})$, параметризованные с помощью $f_q^{\text{F}}(\xi)$, $f_q^{\text{MF}}(\xi)$ и $f_q^{\text{DF}}(\xi)$, не имеют хорошо определённых градиентов в центре ячейки ВЗ. Этим фактом часто пренебрегают, рассматривая только интервал $\xi \in (0, R)$, не включающий начало координат. Градиентные поправки можно определить во всей ячейке ВЗ, если рассматривать $n_q(\mathbf{r})$ как обобщённую функцию или подразумевать, что она локально сглажена в пренебрежимо малой окрестности центра [74]. Тем не менее потенциально такие параметризации могут вызвать затруднения, обсуждаемые в следующих разделах. Кроме того, в случае фазы "лазанья" ненулевая производная $n_q(z)$ при $z \rightarrow 0$ препятствует упоминавшейся выше замене $\tau_q^{(4)}$ на $\tau_{q,v}^{(4)}$ в формуле (4), потому что $\tau_{q,s}^{(4)}$ не обращается в нуль на поверхности $z = 0$.

В последнем случае (фазы "лазанья") параметризация (19) критиковалась также по соображениям симметрии. В то время как имеется чёткое различие между нормальной фазой квазисферических ядер и фазой типа "швейцарский сыр" или между фазами "спагетти" и "антиспагетти", не существует физического отличия между фазами "лазанья" и "антилазанья": конфигурацию с максимумом в центре ячейки ВЗ можно перевести в конфигурацию с минимумом в центре простым сдвигом системы координат. На практике разные параметризации, описывающие лазанью и антилазанью, могут давать очень близкие минимумы энергии, приводя к спонтанной неустойчивости численной процедуры минимизации. Чтобы этого избежать, выбранная параметризация должна одинаково хорошо описывать обе фазы: "лазанья" и "антилазанья". Последнее означает, что для любого профиля $n_q(\xi)$, определяемого некоторым набором параметров χ , должен найтись такой набор параметров χ' , что обратный профиль $n_q(R - \xi)$, полученный последовательным применением пространственного отражения и сдвига, также будет допустимым³ [75]:

$$\forall \chi \exists \chi': n_q(\xi, \chi) = n_q(R - \xi, \chi'). \quad (20)$$

³ Альтернативный способ избежать отличия лазаньи от антилазаньи — это наложить условие $n_{\Lambda q} > 0$.

Если $n_q(\xi, \chi)$ удовлетворяет условию (12) для любого набора параметров χ , то условие (20) гарантирует, что $dn_q/d\xi \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow 0$, так что градиент пробного распределения плотности существует и равен нулю в центре ячейки ВЗ.

Параметризации вида (18) симметричны по отношению к замене лазаньи на антилазанью при условии, что

$$h(\xi; r_q, a_q) = \frac{1}{h(R - \xi; R - r_q, a_q)}. \quad (21)$$

Условие (20) тогда выполняется с $n'_{\Lambda q} = -n_{\Lambda q}$, $n_q^{\text{out}'} = n_q^{\text{out}} + n_{\Lambda q}$, $a'_q = a_q$ и $r'_q = R - r_q$.

Функция $h^{\text{DF}}(\xi; r_q, a_q)$ в формуле (19) не удовлетворяет условию (21). Прямое обобщение, обеспечивающее выполнение данного условия, выглядит как

$$h^{2\text{DF}}(\xi; r_q, a_q) = \exp \left[\left(\frac{r_q - R}{\xi - R} \right)^2 - \left(\frac{r_q}{\xi} \right)^2 \right]. \quad (22)$$

Оно, в частности, гарантирует, что все производные от $n_q(\mathbf{r})$ обращаются в нуль не только на границе, но и в центре ячейки ВЗ. Однако сравнение результатов расчётов по методу ОТФ с различными параметризациями профиля плотности [75] показало, что даже одностороннее "сильное демпфирование", определённое формулой (19), не говоря уже о двустороннем (22), налагает слишком жёсткое ограничение, так как заметно более низкий минимум E можно получить с более слабым ("мягким") демпфированием, которое определяется формулой

$$h^{\text{WDF}}(\xi; r_q, a_q) = \left(\frac{r_q - R}{r_q} \right)^2 \left(\frac{\xi}{\xi - R} \right)^2. \quad (23)$$

Соответствующий профиль плотности не только удовлетворяет условию (12), но и имеет нулевой градиент в центре ячейки ВЗ. При этом более высокие производные профиля плотности на границе и в центре ячейки ВЗ не обнуляются.

В следующем разделе мы покажем, что параметризации, которые не обладают нулевым градиентом при $\xi = 0$, приводят к расходимости функционала E в методе ОТФ в случаях цилиндрической и плоскопараллельной симметрии.

4. Расходимости при негладких параметризациях

4.1. Симметричные параметризации в фазах типа "пасты"

Предположим, что функция $f_q(\xi)$ конечна и дифференцируема при $\xi > 0$. Тогда можно написать

$$n_q(\mathbf{r}) = n_{q0} + n'_{q0} \xi + O(\xi^2), \quad (24)$$

где $n_{q0} = n_q^{\text{out}} + n_{\Lambda q}$ и

$$n'_{q0} = n_{\Lambda q} \left. \frac{df_q(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi \rightarrow +0}.$$

Если $n'_{q0} \neq 0$, то распределение n_q имеет излом в центре ячейки, и градиент ∇n_q в этой точке не является хорошо определённым.

Оценим вклад в интеграл (4) от первого слагаемого в правой части уравнения (11),

$$\tau_{q,v}^{(4a)} = \frac{\hbar^2}{2M_q} \frac{n_q^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}} \frac{1}{270} \left(\frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \right)^2 \propto n_q^{1/3} \left(\frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \right)^2, \quad (25)$$

в малой окрестности $\xi < \varepsilon$ центра ячейки (V_ε). В случаях цилиндрической и плоскопараллельной симметрии мы будем рассматривать ячейки ВЗ конечного объёма V — соответственно отрезок цилиндра единичной длины или участок пластины единичной площади. Объём ε -окрестности центра обозначим V_ε . Для плоскопараллельной, цилиндрической или сферической симметрии имеем $\nabla^2 n_q = \xi^{1-D} (\partial/\partial \xi)(\xi^{D-1} \partial n_q / \partial \xi)$, где $D = 1, 2$ или 3 соответственно.

В случае сферической симметрии формула (24) даёт

$$\begin{aligned} \int_{V_\varepsilon} n_q^{1/3} \left(\frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \right)^2 dV &= 4\pi \int_0^\varepsilon n_q^{-5/3} (\nabla^2 n_q)^2 r^2 dr = \\ &= 16\pi n_{q0}^{-5/3} (n'_{q0})^2 \varepsilon + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь правая часть стремится к нулю при $\varepsilon \rightarrow 0$. Следовательно, можно надёжно изолировать излом в точке $r = 0$, удалив шар достаточно малого радиуса ε вокруг центра, так чтобы не оказать заметного влияния на интеграл (4).

В случае цилиндрической симметрии

$$\begin{aligned} \int_{V_\varepsilon} n_q^{1/3} \left(\frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \right)^2 dV &= 2\pi \int_0^\varepsilon n_q^{-5/3} (\nabla^2 n_q)^2 r_\perp dr_\perp = \\ &= 2\pi n_{q0}^{-5/3} (n'_{q0})^2 \int_0^\varepsilon \frac{dr_\perp}{r_\perp} + O(\varepsilon). \end{aligned} \quad (27)$$

Интеграл в правой части расходится. Следовательно, вклад этой градиентной поправки в $E_{\text{нuc}}$ бесконечен, если только не выполнено условие $n'_{q0} = 0$. Данный результат показывает, что энергия цилиндрической ячейки ВЗ (на единицу длины цилиндра), рассчитанная по теории ОТФ, может быть конечной только при таком распределении плотности $n_q(r_\perp)$, при котором

$$\lim_{r_\perp \rightarrow 0} \frac{dn_q}{dr_\perp} = 0. \quad (28)$$

Для плоскопараллельных ячеек ВЗ имеем $\xi = |z|$. Учитывая, что $d|z|/dz = 2\theta(z) - 1$, где $\theta(z)$ — ступенчатая функция Хевисайда, и $d\theta(z)/dz = \delta(z)$, где $\delta(z)$ — дельта-функция Дирака, получаем $\nabla^2 n_q = 2n'_{q0} \delta(z) + O(1)$. Теперь

$$\int_{V_\varepsilon} n_q^{1/3} \left(\frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \right)^2 dV = \frac{(2n'_{q0})^2}{n_{q0}^{5/3}} \int_{-\varepsilon}^\varepsilon [\delta(z)]^2 dz + O(1). \quad (29)$$

Поскольку квадрат дельта-функции не является интегрируемой функцией, данный интеграл конечен только при $n'_{q0} = 0$, т.е.

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{dn_q}{dz} = 0. \quad (30)$$

4.2. Непрерывность при пересечении поверхности

Условие (30) можно обобщить. Рассмотрим непрерывное распределение $n_q(\mathbf{r})$, которое имеет излом (т.е. разрыв

первой производной) на плоскости $z = 0$: $n_q(\mathbf{r}) = n_{q0}(x, y) + n'_+(x, y)z + O(z^2)$ при $z > 0$ и $n_q(\mathbf{r}) = n_{q0}(x, y) + n'_-(x, y)z + O(z^2)$ при $z < 0$. Его можно записать как

$$n_q(\mathbf{r}) = n_{q0}(x, y) + \frac{n'_+(x, y) + n'_-(x, y)}{2} z + \frac{n'_+(x, y) - n'_-(x, y)}{2} |z| + O(z^2). \quad (31)$$

По аналогии с формулой (29) вклад слагаемого, содержащего $|z|$, в интеграл от $\tau_q^{(4a)}$ по ε -окрестности $V_\varepsilon = \Delta S \otimes [-\varepsilon, \varepsilon]$ любого конечного элемента ΔS плоскости $z = 0$ (например, по параллелепипеду $V_\varepsilon = \{x, y, z : |x| < \Delta x, |y| < \Delta y, |z| < \varepsilon\}$) пропорционален

$$\int_{V_\varepsilon} n_q^{1/3} \left(\frac{\nabla^2 n_q}{n_q} \right)^2 dV = A_{\Delta S} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} [\delta(z)]^2 dz + O(1), \quad (32)$$

где

$$A_{\Delta S} = \int_{\Delta S} \frac{[n'_+(x, y) - n'_-(x, y)]^2}{n_{q0}^{5/3}(x, y)} dS. \quad (33)$$

Если $A_{\Delta S} \neq 0$, то интеграл в (32) бесконечен. Поскольку элемент поверхности ΔS произволен, расходимость устраняется только при условии, что $n'_+(x, y) \equiv n'_-(x, y)$ всюду, кроме, возможно, подмножества точек (x, y) , имеющего меру нуль. Это означает отсутствие излома при пересечении плоскости.

Если $n_q(\mathbf{r})$ имеет излом на гладкой поверхности, не являющейся плоскостью, то достаточно малый участок поверхности можно аппроксимировать касательной плоскостью и применить вышеизложенное рассмотрение для доказательства расходимости. Таким образом, мы приходим к выводу, что распределение $n_q(\mathbf{r})$ не должно иметь излома на гладкой поверхности. В частности, оно не должно иметь излома на границе ячейки ВЗ, если вместо сфер и цилиндров мы рассмотрим настоящие ячейки ВЗ в виде многогранников, заполняющих всё пространство, и минимизируем E в двух или более смежных ячейках одновременно. Предполагая, что распределение $n_q(\mathbf{r})$ симметрично и периодически, приходим к условию (12).

Хотя мы рассмотрели только один член в формуле (11), полученной с использованием теоремы Остроградского – Гаусса, вывод является общим и заранее не предполагает выполнения условия (12). Действительно, можно изолировать положение излома, окружив его поверхностью, на которой $n_q(\mathbf{r})$ является гладким, и применить данную теорему только к вкладу в интеграл (9) от области, окружённой этой поверхностью. Тогда объёмный интеграл от $\tau_q^{(4a)}$ по рассматриваемой области содержит расходимость, обсуждавшуюся выше, тогда как соответствующий интеграл по поверхности, будучи конечен, не может её компенсировать. Кроме того, третье слагаемое в исходном выражении (7), пропорциональное $\tau_q^{(4a)}$ (25), содержит ту же самую расходимость.

5. Предел точности для негладких параметризаций

Можно попытаться обойти условия гладкости (28) или (30) путём введения такого локального изменения $n_q(\mathbf{r})$ в

малой окрестности центра V_ε , что модифицированное пробное распределение плотности $\tilde{n}_q(\mathbf{r})$ совпадает с $n_q(\mathbf{r})$ вне V_ε и всюду имеет непрерывный градиент. Поскольку ε мало, а \tilde{n}_q симметрично и дифференцируемо, мы имеем $\tilde{n}_q|_{\xi \leq \varepsilon} = n_{q0} + O(\varepsilon)$ и $\nabla \tilde{n}_q|_{\xi=\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_\varepsilon = n'_{q0} + O(\varepsilon)$, где \mathbf{n}_ε — внешняя нормаль к поверхности V_ε , которую мы обозначим S_ε . Тогда среднее значение $\nabla^2 \tilde{n}_q$ в области V_ε равно

$$\langle \nabla^2 \tilde{n}_q \rangle \equiv \frac{1}{\|V_\varepsilon\|} \int_{V_\varepsilon} \nabla^2 \tilde{n}_q dV = \oint_{S_\varepsilon} \nabla \tilde{n}_q|_{\xi=\varepsilon} \cdot \mathbf{n}_\varepsilon \frac{dS}{\|V_\varepsilon\|} = [n'_{q0} + O(\varepsilon)] \frac{\|S_\varepsilon\|}{\|V_\varepsilon\|} = \frac{n'_{q0} D}{\varepsilon} + O(1), \quad (34)$$

где $\|V_\varepsilon\| = \|S_\varepsilon\| \varepsilon / D = \pi^{D/2} \varepsilon^D / \Gamma(D/2 + 1)$, а угловые скобки обозначают усреднение. Предполагая, что $n_{q0} \neq 0$, и применяя неравенство $\langle x^2 \rangle \geq \langle x \rangle^2$, получаем

$$\int_{V_\varepsilon} \frac{(\nabla^2 \tilde{n}_q)^2}{\tilde{n}_q^{5/3}} dV \approx \frac{\|V_\varepsilon\|}{n_{q0}^{5/3}} \langle (\nabla^2 \tilde{n}_q)^2 \rangle \geq \frac{\|V_\varepsilon\|}{n_{q0}^{5/3}} \langle \nabla^2 \tilde{n}_q \rangle^2 \approx \frac{D^2 \|V_\varepsilon\|}{\varepsilon^2 n_{q0}^{5/3}} |n'_{q0}|^2, \quad (35)$$

где приближённое равенство подразумевает точность до множителя $1 + O(\varepsilon)$. Таким образом, в пределе малого ε ведущий вклад интеграла от $\tau_q^{(4a)}$ по V_ε в поправку к кинетической энергии $\mathcal{T}_q^{(4a)}$ можно ограничить снизу как

$$\mathcal{T}_{q,\varepsilon}^{(4a)} \equiv \int_{V_\varepsilon} \tau_q^{(4a)} dV \gtrsim \frac{\hbar^2}{540 M_q} \frac{D^2 \|V_\varepsilon\|}{(3\pi^2)^{2/3}} \frac{|n'_{q0}|^2}{\varepsilon^2 n_{q0}^{5/3}}. \quad (36)$$

При рассмотрении участка ячейки ВЗ в фазе "лазанья" ($D = 1$) формула (36) приводит к следующему неравенству для вклада излома в кинетическую энергию в расчёте на один нуклон:

$$\frac{\mathcal{T}_{q,\varepsilon}^{(4a)}}{N} \gtrsim \frac{\hbar^2}{540 M_q} \frac{1}{(3\pi^2)^{2/3}} \frac{n_{q0}^{1/3}}{\bar{n} R} \left(\frac{n'_{q0}}{n_{q0}} \right)^2 \varepsilon^{-1}. \quad (37)$$

Если не выполнено условие $n'_{q0} = 0$, то правая часть (37) стремится к бесконечности при $\varepsilon \rightarrow 0$. Таким образом, точность конечно-разностных расчётов энергии в ОТФ четвёртого порядка имеет фундаментальный предел для негладких пробных функций, так как сетку нельзя произвольно измельчать: чем меньше интервал $(-\varepsilon, \varepsilon)$, в котором производится сглаживание, тем больше его вклад.

Например, в работе [74] фазы типа "пасты" изучались на основе функционала плотности ядерной энергии BSk24 с использованием параметризации демпфированной функцией Ферми (DF), заданной формулами (18) и (19). При этом было найдено, что фаза "лазанья" присутствует в интервале плотности $\bar{n} \sim 0,07 - 0,08 \text{ фм}^{-3}$. В данном интервале оптимальные вариационные параметры составили, соответственно, $R \approx 13,7 - 13,0 \text{ фм}$, $r_p \approx 4,7 - 6,6 \text{ фм}$, $r_n - r_p \sim 0,5 \text{ фм}$, $a_{n,p} \approx 1,0 - 1,3 \text{ фм}$, $n_{\Lambda n} \approx 0,028 - 0,019 \text{ фм}^{-3}$, $n_n^{\text{out}} \approx 0,058 - 0,065 \text{ фм}^{-3}$ и $n_{\Lambda p} \approx 0,007 - 0,005 \text{ фм}^{-3}$. Для таких значений формулы (13), (14), (18), (19) и (37) дают $(\mathcal{T}_{n,\varepsilon}^{(4a)} + \mathcal{T}_{p,\varepsilon}^{(4a)})/N \geq 0,034 - 0,007 \text{ эВ фм}/\varepsilon$. В указанном интервале \bar{n} характерные отличия плотности энергии разных структурных фаз составляют несколько сотен эВ на нуклон. Следовательно, ограничение на достижимую точность было бы суще-

ственным при выполнении численного интегрирования уравнений ОТФ с характерным шагом $\varepsilon \lesssim 10^{-3}$ фм. На самом деле в работе [74] использовалась намного более грубая сетка, что и обеспечило практическую нечувствительность результатов этого исследования к пределу точности (37).

6. Выводы

Рассмотрены условия гладкости для пробного распределения плотности числа частиц $n_q(\mathbf{r})$ в теории ОТФ четвёртого порядка в приближениях сферических, цилиндрических и плоскопараллельных ячеек ВЗ. Показано, что разрыв градиента (излом) пробного распределения плотности на любой гладкой поверхности (которая может быть и границей ячейки ВЗ) или в центре цилиндрической либо плоскопараллельной ячейки ВЗ приводит к расходимости поправки четвёртого порядка в методе ОТФ. С другой стороны, излом $n_q(\mathbf{r})$ в центре сферической ячейки ВЗ не ведёт к расходимости. В последнем случае градиентные поправки второго и четвёртого порядка могут рассматриваться как обобщённые функции и оставаться интегрируемыми.

В предыдущих конечно-разностных расчётах излом распределения $n_q(\mathbf{r})$ иногда понимался (например, в работе [74]) как некоторое приближение к достаточно гладкой функции $\tilde{n}_q(\mathbf{r})$, которая не была определена явно, но подразумевалось, что она совпадает с используемой пробной функцией $n_q(\mathbf{r})$ на узлах сетки. В разделе 5 мы продемонстрировали фундаментальное ограничение точности, присущее такому подходу.

Такое ограничение точности, однако, не делает неверными ранее полученные результаты [73, 74], потому что оно лежит намного ниже уровня погрешности указанных работ. Согласно этим расчётам, для того чтобы правильно определить структурные фазовые переходы между разными фазами ядерной материи в состоянии "пасты", достаточно рассчитать энергию на нуклон с точностью $\lesssim 0,1$ кэВ. В то же время минимальный вклад сглаженного излома в центре ячейки при параметризации типа DF (19), оценённый по формуле (37), в фазе "лазанья" не превышает 0,1 кэВ на нуклон, если $\varepsilon \gtrsim 10^{-3}$ фм. Как отмечено в работе [74], интегралы, вычисленные на сетке с шагом порядка 0,1 фм, соответствуют локальному сглаживанию излома в области $\xi \lesssim 0,01$ фм, что достаточно для заявленной точности.

Стоит подчеркнуть, что численный пример, приведённый выше, относится только к одной конкретной реализации теории ОТФ, основанной на функционале плотности энергии BSk24 [74]. Кроме того, мы использовали приближение $M_q^* = M_q$, при котором численные оценки верны только по порядку величины, а не точно. Предел на шаг по ξ может также быть иным для другой модели взаимодействия. Результат также может зависеть от интервала изменения параметров в процедуре минимизации. Например, в результате расходимостей численная минимизация может иногда приводить к неправдоподобным значениям параметров со значительно большей ошибкой в определении энергии по сравнению с оптимальными значениями параметров.

Во всяком случае, неявное сглаживание расходимостей влечёт риск загрязнения результатов вследствие зависимости от довольно неопределённой сглаживающей функции. Например, численное интегрирование плотно-

сти кинетической энергии с автоматическим выбором шага интегрирования может случайно "почувствовать" вклад от излома, что приведёт к неограниченному измельчению сетки со всё меньшими размерами шага ε вблизи точки излома, таким образом вызывая расходимость, оценка которой была дана в разделе 5. В итоге мы заключаем, что для решения уравнений ОТФ четвёртого порядка с помощью ограниченного вариационного метода рекомендуется использовать пробные функции с производными, гладкими всюду, в том числе и в центре ячейки ВЗ.

Благодарности. А.П. выражает благодарность Д.Г. Яковлеву за полезные замечания к предварительному тексту статьи. Работа А.П. и А.Ч. поддержана грантом Российского научного фонда № 22-12-00048. Работа Н.Ш. финансово поддержана Фландрским исследовательским фондом (FWO, Бельгия) и Фондом научных исследований (Fonds de la Recherche Scientifique, Бельгия) по программе "Excellence of Science" (EOS, проект № 40007501). Работа Н.Ш. поддержана Фондом научных исследований (Бельгия) по гранту № PISN 4.4502.19.

Список литературы

1. Thomas L H *Proc. Camb. Philos. Soc.* **23** 542 (1927)
2. Fermi E *Rend. Accad. Naz. Lincei* **6** 602 (1927)
3. Киржниц Д А, Лозовик Ю Е, Шпатаковская Г В *УФН* **117** 3 (1975); Kirzhnits D A, Lozovik Yu E, Shpatakovskaya G V *Sov. Phys. Usp.* **18** 649 (1975)
4. Ring P, Schuck P *The Nuclear Many-Body Problem* (Berlin: Springer-Verlag, 1980) Ch. 13
5. Brack M, Bhaduri R K *Semiclassical Physics* (Boston, MA: Addison-Wesley, 1997) Ch. 4
6. Шпатаковская Г В *УФН* **182** 457 (2012); Shpatakovskaya G V *Phys. Usp.* **55** 429 (2012)
7. v. Weizsäcker C F Z. *Phys.* **96** 431 (1935)
8. Компанеев А С, Павловский Е С *ЖЭТФ* **31** 427 (1956); Companeev A S, Pavlovskii E S *Sov. Phys. JETP* **4** 328 (1957)
9. Киржниц Д А *ЖЭТФ* **32** 115 (1957); Kirzhnits D A *Sov. Phys. JETP* **5** 64 (1957)
10. Hodges C H *Can. J. Phys.* **51** 1428 (1973)
11. Grammaticos B, Voros A *Ann. Physics* **123** 359 (1979)
12. Brack M, Guet C, Håkansson H-B *Phys. Rep.* **123** 275 (1985)
13. Bengtsson R, Schuck P *Phys. Lett. B* **89** 321 (1980)
14. Brack M *Phys. Rev. Lett.* **53** 119 (1984)
15. Pudliner B S et al. *Phys. Rev. Lett.* **74** 4396 (1995)
16. Arriaga A, Pandharipande V R, Wiringa R B *Phys. Rev. C* **52** 2362 (1995)
17. Wang P Y et al. *Phys. Rev. C* **109** 064316 (2024)
18. Bender M, Heenen P-H, Reinhard P-G *Rev. Mod. Phys.* **75** 121 (2003)
19. Skyrme T H R *Nucl. Phys.* **9** 615 (1958–1959)
20. Chamel N, Goriely S, Pearson J M *Phys. Rev. C* **80** 065804 (2009)
21. Vautherin D, Brink D M *Phys. Rev. C* **5** 626 (1972)
22. Onsi M et al. *Phys. Rev. C* **77** 065805 (2008)
23. Pearson J M, Chamel N, Goriely S, Ducoin C *Phys. Rev. C* **85** 065803 (2012)
24. Pearson J M, Chamel N, Pastore A, Goriely S *Phys. Rev. C* **91** 018801 (2015)
25. Chamel N, Pearson J M, Shchepochin N N *Phys. Rev. C* **110** 045808 (2024)
26. Shelley M, Pastore A *Universe* **6** (11) 206 (2020)
27. Bethe H A *Phys. Rev.* **167** 879 (1968)
28. Brack M, Jennings B K, Chu Y H *Phys. Lett. B* **65** 1 (1976)
29. Strutinsky V M *Nucl. Phys. A* **95** 420 (1967)
30. Jennings B K *Nucl. Phys. A* **207** 538 (1973)
31. Aboussir Y et al. *Nucl. Phys. A* **549** 155 (1992)
32. Ravenhall D G, Pethick C J, Wilson J R *Phys. Rev. Lett.* **50** 2066 (1983)

33. Lorenz C P, Ravenhall D G, Pethick C J *Phys. Rev. Lett.* **70** 379 (1993)
34. Pethick C J, Ravenhall D G *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **45** 429 (1995)
35. Haensel P, Potekhin A Y, Yakovlev D G (Eds) *Neutron Stars I: Equation of State and Structure* (Astrophysics and Space Science Library, Vol. 326) (New York: Springer, 2007) <https://doi.org/10.1007/978-0-387-47301-7>
36. Chamel N, Haensel P *Living Rev. Relativity* **11** 10 (2008)
37. Schneider A S et al. *Phys. Rev. C* **88** 065807 (2013)
38. Pethick C J, Potekhin A Y *Phys. Lett. B* **427** 7 (1998)
39. Pethick C J, Zhang Z-W, Kobyakov D N *Phys. Rev. C* **101** 055802 (2020)
40. Xia C-J et al. *Phys. Lett. B* **839** 137769 (2023)
41. Zemlyakov N A, Chugunov A I *Universe* **9** (5) 220 (2023)
42. Haensel P, Kutschera M, Prószyński M *Astron. Astrophys.* **102** 299 (1981)
43. Sakuragi Y *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2016** 06A106 (2016) <https://doi.org/10.1093/ptep/ptw072>
44. Tondeur F, Berdichevsky D, Farine M Z. *Phys. A* **325** 405 (1986) <https://doi.org/10.1007/BF01290042>
45. Horowitz C J, Piekarewicz J, Reed B *Phys. Rev. C* **102** 044321 (2020)
46. Wigner E, Seitz F *Phys. Rev.* **43** 804 (1933)
47. Salpeter E E *Astrophys. J.* **134** 669 (1961)
48. Chamel N et al. *Phys. Rev. C* **75** 055806 (2007)
49. Onsi M, Przyzieziak H, Pearson J M *Phys. Rev. C* **55** 3139 (1997)
50. Barkat Z, Buchler J-R, Ingber L *Astrophys. J.* **176** 723 (1972)
51. Suraud E, Vautherin D *Phys. Lett. B* **138** 325 (1984)
52. Suraud E *Nucl. Phys. A* **462** 109 (1987)
53. Centelles M et al. *Nucl. Phys. A* **510** 397 (1990)
54. Suraud E *Astron. Astrophys.* **143** 108 (1985)
55. Centelles M, Del Estal M, Viñas X *Nucl. Phys. A* **635** 193 (1998)
56. Davies K T R et al. *Nucl. Phys. A* **342** 111 (1980)
57. Bartel J, Brack M, Durand M *Nucl. Phys. A* **445** 263 (1985)
58. Pearson J M et al. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **481** 2994 (2018) <https://doi.org/10.1093/mnras/sty2413>
59. Oyamatsu K *Nucl. Phys. A* **561** 431 (1993)
60. Arponen J *Nucl. Phys. A* **191** 257 (1972)
61. Gögelein P, Mütter H *Phys. Rev. C* **76** 024312 (2007)
62. Lim Y, Holt J W *Phys. Rev. C* **95** 065805 (2017)
63. Oyamatsu K, Iida K *Phys. Rev. C* **75** 015801 (2007)
64. Oyamatsu K, Iida K *Phys. Rev. C* **81** 054302 (2010)
65. Dutta A K et al. *Nucl. Phys. A* **458** 77 (1986)
66. Shelley M, Pastore A *Phys. Rev. C* **103** 035807 (2021)
67. Barranco M, Buchler J-R *Phys. Rev. C* **24** 1191 (1981)
68. Viñas X et al. *J. Phys. Colloq.* **45** C6-103 (1984) <https://doi.org/10.1051/jphyscol:1984612>
69. Kolehmainen K et al. *Nucl. Phys. A* **439** 535 (1985)
70. Pi M et al. *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **64** 439 (1986)
71. Martin N, Urban M *Phys. Rev. C* **92** 015803 (2015)
72. Chu Y H, Jennings B K, Brack M *Phys. Lett. B* **68** 407 (1977)
73. Shchepochin N N, Chamel N, Pearson J M *Phys. Rev. C* **108** 025805 (2023)
74. Pearson J M, Chamel N, Potekhin A Y *Phys. Rev. C* **101** 015802 (2020)
75. Shchepochin N N et al. *Phys. Rev. C* **109** 055802 (2024)

On variational trial functions in extended Thomas–Fermi method

A.Yu. Potekhin^{(1,*), A.I. Chugunov^{(1), N.N. Shchepochin^{(2), N. Chamel⁽²⁾}}}

⁽¹⁾ Ioffe Institute, ul. Politekhmicheskaya 26, 194021 St. Petersburg, Russian Federation

⁽²⁾ Institut d’Astronomie et d’Astrophysique, CP-226, Université Libre de Bruxelles, 1050 Brussels, Belgium

E-mail: ^(*) palex@astro.ioffe.ru

Parametrized nucleon density distributions are widely employed for the calculation of the properties of atomic nuclei and dense inhomogeneous matter in compact stars within the Thomas–Fermi method and its extensions. We show that the use of insufficiently smooth parametrizations may deteriorate the accuracy of this method. We discuss and clarify the smoothness condition using the example of the so-called ‘nuclear pasta’ in the neutron star mantle.

Keywords: superdense matter, neutron star crust, Thomas–Fermi model, equation of state and phase equilibrium

PACS numbers: **26.60.–c**, **26.60.Gj**, **31.15.bt**, **64.10.+h**

Bibliography — 75 references

Received 27 June 2024, revised 7 November 2024

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **195** (7) 738–746 (2025)

Physics–Uspekhi **68** (7) (2025)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.11.039804>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2024.11.039804>