



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

3635/82

9/8-82

P4-82-349

И.Ж.Петков, М.В.Стоицов

МЕТОД
ЛОКАЛЬНО-МАСШТАБНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ
ДЛЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ
МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ

Направлено в журнал "Теоретическая
и математическая физика"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

Основное состояние A -частичной квантовомеханической системы с гамильтонианом H описывается точной многочастичной волновой функцией $\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$, которая удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера:

$$H \Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = E_0 \Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \quad /1/$$

с самым низким собственным значением, определяющим энергию системы. Однако даже когда гамильтониан H имеет полностью определенный вид, уравнение Шредингера допускает точное решение только в очень ограниченном числе случаев, отвечающих простым или схематичным квантовомеханическим системам. Это делает необходимым использование приближенных методов, наиболее часто встречаемый из которых - вариационный.

Согласно вариационному принципу Шредингера в квантовой механике^{/1/} решение Ψ_0 уравнения /1/ минимизирует среднее значение гамильтониана H :

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad /2/$$

взятое по состояниям $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$, принадлежащим гильбертову пространству \mathcal{H} динамических состояний рассматриваемой системы. Для невырожденного основного состояния $\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \in \mathcal{H}$ в силе неравенство

$$E_0 = E[\Psi_0] < E[\Psi] \quad /3/$$

для любой функции $\Psi \in \mathcal{H}$, отличной от $\Psi_0 \in \mathcal{H}$.

Вариационный метод состоит в поиске локального минимума энергетического функционала $E[\Psi]$ в рамках фиксированного класса пробных многочастичных волновых функций. Этот минимум определяет приближенно основное состояние рассматриваемой системы. Таким образом, все вариационные методы, какими, в частности, являются методы Хартри-Фока /ХФ/, Хартри-Фока-Боголюбова, Хила-Уилера /ХУ/ и др., уже различаются между собой исключительно классом пробных волновых функций, на котором минимизируется энергетический функционал /2/.

Многочастичная волновая функция $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$, однако, представляет очень сложный математический объект для практи-

ческой реализации вариационного метода. Его сложность сильно нарастает с увеличением числа частиц в системе. Кроме того, многочастичная волновая функция содержит в себе огромную информацию о системе, большая часть которой является излишней при описании характеристик основного состояния. Вот почему представляет интерес сформулировать как вариационный принцип Шредингера, так и построенный на его базе вариационный метод в терминах одной, более простой динамической переменной.

Согласно доказанной в 1964 г. теореме Коона^{/2/} энергия многочастичной системы представляет функционал $E[\rho]$ локальной плотности $\rho(\vec{r})$ частиц в системе, абсолютный минимум которого определяет основное состояние. К сожалению, однако, теорема Коона не дает никакого указания о виде и способе построения этого энергетического функционала. Существует очень широкий круг подходов^{/3/}, которые используют различные аппроксимации $E[\rho]$, но все они, с одной стороны, содержат в большей или меньшей степени феноменологию, а с другой - не дают возможности из определения $\rho(\vec{r})$ воспроизвести микроскопические характеристики многочастичной системы.

В настоящей работе предложен метод локально-масштабного преобразования /МЛМП/, который дает возможность полного микроскопического описания основного состояния A -частичной квантовомеханической системы на базе одной единственной динамической переменной - функции локально-масштабного преобразования /ЛМП/ $f(\vec{r})$. Эта функция оказывается взаимно-однозначно связанной с локальной плотностью частиц в системе $\rho(\vec{r})$, которая имеет непосредственный физический смысл.

Сущность МЛМП /часть II / состоит в выполнении ЛМП подходящим образом выбранной /"модельной"/ волновой функции $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \in \mathcal{H}$. Полученная в результате ЛМП пробная волновая функция $\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$ принадлежит орбите \mathcal{O} пространства \mathcal{H} относительно группы ЛМП, \mathcal{F} и превращает энергию системы в энергетический функционал $E[f]$, который подлежит минимизации.

В части III доказывается, что вариационный принцип Шредингера можно сформулировать точно через функцию ЛМП. Доказана также теорема о локально-плотностном энергетическом функционале, что является строгим обоснованием широкоизвестного метода функционала плотности^{/3/}.

Явный вид операторов унитарного представления $\mathcal{U}_{\mathcal{F}}$ группы \mathcal{F} в пространстве \mathcal{H} дан в части IV. Поскольку группа $\mathcal{U}_{\mathcal{F}}$ является подгруппой общей группы канонических унитарных преобразований в квантовой механике^{/4/}, МЛМП имеет ряд общих моментов с методом точечного преобразования^{/5/}, использованным с успехом в теории твердого тела^{/6/}.

В заключении /часть V / обсуждается возможность конкретного практического приложения МЛМП для определения основного состояния многочастичных квантовомеханических систем. Это

возможно, поскольку МЛМП содержит ясный конструктивный элемент, который показывает однозначно путь построения энергетического функционала $E[f]$ /соответственно $E[\rho]$ / в рамках фиксированной с помощью $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$ орбиты $\bar{O} \subset \mathcal{K}$.

2. МЕТОД ЛОКАЛЬНО-МАСШТАБНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Локально-масштабное преобразование трехмерного вещественного векторного пространства

$$\vec{R}_3 = \{ \vec{r} = (r, \vec{r}_0); r \in \mathbb{R}, \vec{r}_0 \in \Omega \}, \quad /4/$$

где \mathbb{R} и Ω обозначают соответственно пространства, в которых изменяются величины $r = |\vec{r}|$ и направление $\vec{r}_0 = \vec{r}/r$ вектора $\vec{r} \in \vec{R}_3$, задается векторной функцией

$$\vec{f}(\vec{r}) = \vec{r}_0 f(\vec{r}), \quad /5/$$

которая всякому вектору $\vec{r} \in \vec{R}_3$ ставит во взаимно-однозначное соответствие вектор $\vec{f} \equiv \vec{f}(\vec{r}) \in \vec{R}_3$, имеющий то же направление $\vec{r}_0 \in \Omega$, но с измененной длиной $r' \equiv f(\vec{r}) \in \mathbb{R}$, зависящей от скалярной функции ЛМП - $f(\vec{r})$. Множество \mathcal{F} векторных функций, имеющих вид /5/, образует группу ЛМП на пространстве \vec{R}_3 с групповой операцией, сопоставляющей любым двум элементам f_1 и f_2 , из \mathcal{F} элемент $f \in \mathcal{F}$ по правилу

$$\vec{f}_1 \vec{f}_2 \rightarrow f = f_2(f_1), \quad /6/$$

если функция ЛМП $f(r, \vec{r}_0)$

- а/ непрерывно дифференцируема по своим аргументам;
- б/ монотонно растет от $r \in \mathbb{R}$ для любого $r_0 \in \Omega$;
- в/ имеет значения в \mathbb{R} такие, что функциональный определитель

$$D(\vec{f}(\vec{r})/\vec{r}) \equiv \frac{D(f_x, f_y, f_z)}{D(x, y, z)} = \frac{f^2}{r^2} \frac{\partial f}{\partial r}. \quad /7/$$

отличен от нуля во всем пространстве \mathbb{R}_3 .

Роль единичного элемента $f_e \equiv \vec{r}$ в группе \mathcal{F} исполняет тождественное преобразование. Для каждого элемента $f \in \mathcal{F}$ существует и однозначно определен его обратный элемент $f^{-1} \in \mathcal{F}$. Согласно /5/ последний задается скалярной функцией $f^{-1}(\vec{r})$, обратной к $f(\vec{r})$.

Всякому элементу $f \in \mathcal{F}$ сопоставим A -частичный оператор $U_f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A)$, действующий в гильбертовом пространстве \mathcal{K} динамических состояний системы с гамильтонианом H по правилу:

$$U_f \bar{\Psi}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) = D^{1/2}(\vec{f}(\vec{r}_1)/\vec{r}_1) \times \dots \times D^{1/2}(\vec{f}(\vec{r}_A)/\vec{r}_A) \bar{\Psi}(\vec{f}(\vec{r}_1), \dots, \vec{f}(\vec{r}_A)), \quad /8/$$

где $\bar{\Psi}$ - произвольная функция, принадлежащая \mathcal{K} , а D - якобиан /7/ ЛМП пространства \vec{R}_3 . Согласно /8/ U_f представляет собой линейный вещественный унитарный оператор, действующий в пространстве \mathcal{K} .

Если через $U_{\mathcal{F}} = \{ U_f; f \in \mathcal{F} \}$ обозначим совокупность всех операторов U_f , соответствующих элементам $f \in \mathcal{F}$, то $U_{\mathcal{F}}$ превращается в группу по отношению к обычному операторному умножению. Тогда соответствие $\mathcal{F} \rightarrow U_{\mathcal{F}}$, для которого выполняются равенства

$$U_{f_e} = I, \quad U_{f_1 f_2} = U_{f_1} U_{f_2}, \quad /9/$$

представляет гоморфизм группы \mathcal{F} в пространстве $U_{\mathcal{F}}$ унитарных операторов, определенных равенством /8/. Группа $U_{\mathcal{F}}$ является унитарным представлением \mathcal{F} в пространстве \mathcal{K} .

Рассмотрим некоторую фиксированную /"модельную"/ волновую функцию $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$; действуя на нее элементами $U_f \in U_{\mathcal{F}}$, построим орбиту

$$\bar{O} = \{ U_f \bar{\Psi}; U_f \in U_{\mathcal{F}} \} \quad /10/$$

на пространстве \mathcal{K} по отношению к группе $U_{\mathcal{F}}$. Согласно общей теории групп пространство \mathcal{K} распадается на попарно непересекающиеся орбиты по отношению к группе $U_{\mathcal{F}}$, действующей в нем.

Покажем, что группы \mathcal{F} и $U_{\mathcal{F}}$ изоморфны. Для этой цели достаточно показать, что ядро ($\text{Ker } U_{\mathcal{F}}$) гомоморфизма $\mathcal{F} \rightarrow U_{\mathcal{F}}$ состоит только из единичного элемента $f_e \in \mathcal{F}$. Действительно, пусть $f \in \text{Ker } U_{\mathcal{F}}$ - произвольный элемент ядра гомоморфизма $\mathcal{F} \rightarrow U_{\mathcal{F}}$. Тогда соответствующий ему в $U_{\mathcal{F}}$ вещественный оператор U_f согласно /8/ действует на произвольную функцию $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$ и на ее комплексно-сопряженную $\bar{\Psi}^* \in \mathcal{K}$ как

$$\bar{\Psi}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) = D_1^{1/2} \times \dots \times D_A^{1/2} \bar{\Psi}(\vec{f}(\vec{r}_1), \dots, \vec{f}(\vec{r}_A)), \quad /11/$$

$$\bar{\Psi}^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) = D_1^{1/2} \times \dots \times D_A^{1/2} \bar{\Psi}^*(\vec{f}(\vec{r}_1), \dots, \vec{f}(\vec{r}_A)).$$

Умножим почленно равенства /11/ и проинтегрируем полученное уравнение по $\vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_A$ во всем пространстве и по r_1 в границах $0 \div r$. Нетрудно видеть, что, используя явный вид якобиана /7/, приходим к равенству

$$\int_0^r W(u) u^2 du = 0, \quad /12/$$

которое справедливо для любого $r \in \mathbb{R}$ и $r_0 \in \Omega$. Функция

$$W = \int |\bar{\Psi}(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A \quad /13/$$

неотрицательна и не зануляется тождественно, когда $\Psi \in \mathcal{K}$. Следовательно, уравнение /12/ справедливо тогда и только тогда, когда $f(\vec{r}, \vec{r}_0) \equiv f$, т.е. $\vec{r} \equiv \vec{r}_e \in \mathcal{F}$. Таким образом,

$$\text{Ker } \mathcal{U}_{\mathcal{F}} = \{\vec{r}_e\}, \quad /14/$$

что доказывает изоморфность $(\mathcal{F} \sim \mathcal{U}_{\mathcal{F}})$ групп \mathcal{F} и $\mathcal{U}_{\mathcal{F}}$. Установленный изоморфизм $\mathcal{F} \sim \mathcal{U}_{\mathcal{F}}$ дает возможность, с одной стороны, интерпретировать $\mathcal{U}_{\mathcal{F}}$ как группу ЛМП пространства \mathcal{K} , а с другой - орбиты $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$ представить через элементы группы \mathcal{F} :

$$\mathcal{O} = \{\mathcal{U}_{\vec{r}} \bar{\Psi}; \vec{r} \in \mathcal{F}\}. \quad /15/$$

Под собственной орбитой пространства \mathcal{K} для систем с гамильтонианом H будем понимать орбиту $\mathcal{O}_H \subset \mathcal{K}$, содержащую в себе точную многочастичную волновую функцию $\Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) \in \mathcal{K}$, представляющую решение стационарного уравнения Шредингера /1/, собственному значению которого согласно вариационному принципу Шредингера удовлетворяет неравенство /3/.

Обозначим через $\Psi_{\vec{r}} = \mathcal{U}_{\vec{r}} \bar{\Psi}$ пробную многочастичную волновую функцию, принадлежащую произвольной орбите $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$. Среднее значение /2/ гамильтониана H , взятое по состояниям $\Psi_{\vec{r}} \in \mathcal{O}$, превращается в энергетический функционал, имеющий вид:

$$E[f] = \frac{\langle \Psi_{\vec{r}} | H | \Psi_{\vec{r}} \rangle}{\langle \Psi_{\vec{r}} | \Psi_{\vec{r}} \rangle}. \quad /16/$$

Полное гильбертово пространство \mathcal{K} является объединением всех попарно непересекающихся орбит $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$. Поэтому исследование всех функций $\Psi \in \mathcal{K}$ /по отношению $E[\Psi]$ / сводится к исследованию всех орбит $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$ и поиску минимума $E[f]$ на функциях $\vec{r} \in \mathcal{F}$ в рамках каждой из этих орбит. Следовательно, с точки зрения вариационного метода ЛМП определяет класс пробных волновых функций, как орбит \mathcal{O} пространства \mathcal{K} по отношению к группе ЛМП, а минимум $E[f]$ на орбите \mathcal{O} определяет приблизительно энергию системы в основном состоянии. Итак, МЛМП для основного состояния многочастичной системы включает в себя следующие три этапа:

1/ Выбор "модельной" волновой функции $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$, что согласно /8/, /15/ определяет класс $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$ пробных волновых функций.

2/ Построение энергетического функционала $E[f]$ из /16/ по гамильтониану H рассматриваемой системы.

3/ Решение уравнения стационарности $E[f]$ при дополнительных условиях: при вариациях $\vec{r}(\vec{r})$ не должно выходить за пределы \mathcal{F} :

$$\frac{\delta E[f]}{\delta f(\vec{r})} = 0; \quad \vec{r} \in \mathcal{F}. \quad /17/$$

Точность метода существенно зависит от выбора пространства пробных волновых функций $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$, что присуще всем вариационным методам. Модельная волновая функция должна быть достаточно простой для проведения конкретных вычислений, и в то же время пробная волновая функция $\Psi_{\vec{r}} \in \mathcal{O}$ должна изменяться в достаточно широкой или в достаточно подходящей области, чтобы полученное решение было близко к точному. Во всех случаях, однако, в силу неравенство

$$\bar{E} \geq E_f \geq E_0, \quad /18/$$

где $\bar{E} \equiv E[\bar{\Psi}]$ - энергия состояния, определяемого "модельной" функцией $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$, а E_f - энергия основного состояния в МЛМП, получаемая после подстановки в /16/ решения уравнения /17/.

Без ограничения общности можем считать, что $\bar{\Psi}$ нормирована на единицу: $\langle \bar{\Psi} | \bar{\Psi} \rangle = 1$. Из-за унитарности операторов $\mathcal{U}_{\vec{r}} \in \mathcal{U}_{\mathcal{F}}$ пробные волновые функции $\Psi_{\vec{r}} \in \mathcal{O}$ также нормированы на единицу:

$$\langle \Psi_{\vec{r}} | \Psi_{\vec{r}} \rangle = \langle \bar{\Psi} | \mathcal{U}_{\vec{r}}^{-1} \mathcal{U}_{\vec{r}} | \bar{\Psi} \rangle = \langle \bar{\Psi} | \bar{\Psi} \rangle = 1. \quad /19/$$

Поэтому энергетический функционал /16/ принимает вид

$$E[f] = \langle \Psi_{\vec{r}} | H | \Psi_{\vec{r}} \rangle. \quad /20/$$

Из /19/ ясно, что условие /17/, заключающееся в том, что \vec{r} не должно выходить за пределы группы \mathcal{F} , связано с требованием сохранения нормы волновой функции в процессе вариации.

Введем эффективный гамильтониан $H[f]$, имеющий вид

$$H[f] = \mathcal{U}_{\vec{r}}^{-1}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) H \mathcal{U}_{\vec{r}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A), \quad /21/$$

где H - гамильтониан рассматриваемой системы. Тогда из /17/, /19/-/21/ получаем важный результат, заключающийся в том, что зависимость от функции ЛМП $f(\vec{r})$ как энергетического функционала

$$E[f] = \langle \bar{\Psi} | H[f] | \bar{\Psi} \rangle, \quad /22/$$

так и уравнения на его стационарность

$$\langle \bar{\Psi} | \frac{\delta H[f]}{\delta f(\vec{r})} | \bar{\Psi} \rangle = 0; \quad \vec{r} \in \mathcal{F}, \quad /23/$$

является универсальной и не зависит от орбиты $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$, на которой применяется МЛМП. Эта универсальность особенно полезна в практическом плане, поскольку независимо от "модельной" волновой функции $\bar{\Psi}$, которая выступает как параметрическая функция, МЛМП может быть унифицирован для широкого круга физических задач, к которым он применим.

3. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП.

ТЕОРЕМА ЛОКАЛЬНО-ПЛОТНОСТНОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ФУНКЦИОНАЛА В МЛМП

Покажем, что для собственной орбиты $\bar{O}_H \subset K$ вариационный принцип Шредингера может быть точно сформулирован через функцию ЛМП - $f(\vec{r})$. С этой целью прежде всего докажем, что в \bar{O}_H энергетический функционал $E[f]$ представляет однозначный функционал от $f(\vec{r})$. Доказательство следует от противного.

Предположим, что в группе \mathcal{F} существуют две различные функции:

$$\vec{f}(\vec{r}) \neq \vec{g}(\vec{r}); \quad \vec{f}, \vec{g} \in \mathcal{F}, \quad /24a/$$

которые дают одно и то же значение

$$E[f] = E[g] \quad /24б/$$

энергетического функционала /16/, определенного на собственной орбите $\bar{O}_H \subset K$. Без ограничения общности, поскольку $\Psi_0 \in \bar{O}_H$, можем принять, что "модельная" функция $\bar{\Psi}$ определена равенством

$$\bar{\Psi}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) = \mathcal{U}_{\vec{g}^{-1}} \Psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) = \mathcal{U}_{\vec{g}}^{-1} \Psi_0. \quad /25/$$

Тогда пробные волновые функции $\Psi_{\vec{g}}$ и $\Psi_{\vec{f}}$ даются согласно /8/, /9/, /25/ равенствами:

$$\Psi_{\vec{g}} = \mathcal{U}_{\vec{g}} \bar{\Psi} = \mathcal{U}_{\vec{g}} \mathcal{U}_{\vec{g}}^{-1} \Psi_0 = \Psi_0. \quad /26/$$

$$\Psi_{\vec{f}} = \mathcal{U}_{\vec{f}} \bar{\Psi} = \mathcal{U}_{\vec{f}} \mathcal{U}_{\vec{g}}^{-1} \Psi_0 = \mathcal{U}_{\vec{f}\vec{g}^{-1}} \Psi_0 = \Psi_{\vec{h}},$$

где $\vec{h} = \vec{f}\vec{g}^{-1} \in \mathcal{F}$ согласно /6/ имеет вид $\vec{h} = \vec{g}^{-1}(\vec{f})$ и не совпадает с тождественным преобразованием $\vec{f}_e \equiv \vec{f}$, поскольку в силу /24а/. Отсюда следует, что мы имеем в \bar{O}_H две различные функции, $\Psi_{\vec{g}}$ и $\Psi_{\vec{f}}$ ($\Psi_0 \neq \Psi_{\vec{h}}$), для которых

$$E_0 \equiv E[\Psi_0] = E[\Psi_{\vec{h}}]. \quad /27/$$

Уравнение /27/ противоречит строгому неравенству /3/, справедливому для невырожденного основного состояния /1/ системы, что произошло из-за допущения /24/. Таким образом, получаем, что в $\bar{O}_H - E[f]$ представляет однозначный функционал от $f(\vec{r})$, это означает, что не существует двух различных функций ЛМП, которые давали бы одно и то же значение энергии системы.

Произвольную вариацию $\vec{f} \in \mathcal{F}$ можно реализовать функцией $\vec{f} = (\vec{g} + \delta\vec{f}) \in \mathcal{F}$, где через $\vec{g} \in \mathcal{F}$ обозначена векторная функция, которая посредством /25/ определяет "модельную" функцию $\bar{\Psi}$. Но

согласно /3/, /16/, /25/ $\vec{f} \in \mathcal{F}$ определяет значение $E[\eta]$, для которого выполняется неравенство

$$E[g] \leq E[\eta], \quad /28/$$

чем и устанавливается свойство минимальности энергетического функционала $E[f]$ по отношению к произвольным вариациям, не выводящим \vec{f} вне \mathcal{F} .

И наконец, то, что абсолютный минимум $E_0 = E[g]$ достигается в процессе вариации по $f(\vec{r})$, следует из того факта, что $E[f]$ построен над собственной орбитой $\bar{O}_H \subset K$, содержащей в себе точную волновую функцию Ψ_0 , чем и завершается доказательство.

По определению локальная плотность частиц системы, находящейся в состоянии, определяемом волновой функцией $\Psi \in K$, задается выражением

$$\rho(\vec{r}) = A \int \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A, \quad /29/$$

где предполагается, что $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$, а множитель A нормирует $\rho(\vec{r})$ на число частиц в системе:

$$\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = A. \quad /30/$$

Пусть $\Psi_{\vec{f}}$ принадлежит орбите $\bar{O}_H \subset K$, построенной с помощью фиксированной "модельной" функции $\bar{\Psi} \in K$, которая согласно /29/ определяет "модельную" плотность:

$$\bar{\rho}(\vec{r}) = A \int \bar{\Psi}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \bar{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A. \quad /31/$$

Покажем, что для всякой фиксированной орбиты $\bar{O}_H \subset K$ локальная плотность $\rho(\vec{r})$ взаимно-однозначно связана с функцией ЛМП $f(\vec{r})$. Действительно, подставляя $\Psi_{\vec{f}}$ в уравнение /29/, получаем связь между локальной плотностью $\rho(\vec{r})$, функцией $f(\vec{r})$ и "модельной" плотностью $\bar{\rho}(\vec{r})$:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{f^2}{r^2} \frac{\partial f}{\partial r} \bar{\rho}(\vec{r}), \quad /32/$$

где был использован явный вид /7/ якобиана ЛМП. Уравнение /32/, решенное относительно df/dr , представляет обыкновенное нелинейное дифференциальное уравнение вида

$$\frac{df}{dr} = F(r, f), \quad F(r, f) = \frac{\rho}{r} \frac{f^2}{r^2}, \quad /33/$$

которое параметрически зависит от направления $\vec{r}_0 \in \Omega$ вектора $r \in R_3$. Отсюда для любого фиксированного $r_0 \in \Omega$ функция F является непрерывной по $r \in R$ при достаточно общих матема-

тических условиях на вид функции $\rho, f, \bar{\rho}$. Но тогда доказывается теорема /77/ существования и единственности решения уравнения /33/, откуда следует, что между ρ и f существует взаимно-однозначное соответствие в рамках фиксированной орбиты \bar{O} , определяющей вид "модельной" плотности $\bar{\rho}$. Поскольку $\rho(\vec{r})$ и $f(\vec{r})$ одночастично связаны, мы можем считать, что уравнение /32/ решено относительно $f(\vec{r})$ и $f(\vec{r})$ выражено через локальную плотность $\rho(\vec{r})$. Таким образом, видим, что многочастичная волновая функция $\Psi_f \rightarrow \Psi_\rho$ и энергия системы $E[f] \rightarrow E[\rho]$ в МЛМП представляют фактически функциональные плотности $\rho(\vec{r})$.

В такой локально-плотностной формулировке приходим к теореме о локально-плотностном энергетическом функционале в МЛМП, согласно которой МЛМП превращает энергию многочастичной системы в функционал локальной плотности $\rho(\vec{r})$ в рамках фиксированной $\bar{O} \in \mathcal{K}$ орбиты. Условие стационарности /17/ принимает вид

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} = 0, \quad /34/$$

где согласно /17/, /19/, /29/ вариация $E[\rho]$ проводится при дополнительном условии /30/ сохранения числа частиц в системе.

Этот результат точен для собственной орбиты \bar{O}_H системы с гамильтонианом H . В этом случае мы пришли к теореме, близкой по содержанию к теореме Коона /21/.

В отличие от теоремы Коона, однако, МЛМП содержит конструктивный элемент, так как открывает возможность на основе /1-3/ /часть 2/ получить приближенное описание основного состояния многочастичной системы в рамках произвольной орбиты $\bar{O} \in \mathcal{K}$.

4. УСЛОВИЕ МИНИМУМА В МЛМП. ГИПЕРВИРИАЛЬНАЯ ТЕОРЕМА

Пусть, для определенности, гамильтониан H A -частичной системы представим в виде

$$H = \sum_{i=1}^A T(\vec{r}_i) + \sum_{i<j}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \quad /35/$$

где

$$T(\vec{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2_{\vec{r}_i} + v(\vec{r}_i) \quad /36/$$

представляет одночастичный оператор i -той частицы, а $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ - двухчастичное взаимодействие между i -той и j -той частицами. Для простоты внешнее поле $v(\vec{r})$, действующее на систему, включено в одночастичный оператор $T(\vec{r})$ и опускаем спиновые и /или/ изоспиновые переменные гамильтониана H .

На первый взгляд, эффективный гамильтониан /21/, полученный на базе /35/, /36/, выглядит как сложный A -частичный опе-

ратор. Согласно определяющему равенству /8/, однако, $U_f \in U_{\mathcal{F}}$ представляет произведение

$$U_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = \prod_{i=1}^A U_f(\vec{r}_i) \quad /37/$$

A коммутирующих между собой линейных, вещественных, унитарных операторов $\{U_f(\vec{r}_i); i=1, 2, \dots, A\}$, каждый из которых реализует ЛМП "модельной" волновой функции $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A)$ по соответствующей \vec{r}_i -й координате. В явном виде одночастичный унитарный оператор

$$U_f(\vec{r}) = \exp(iW); \quad \bar{W} = W, \quad /38/$$

может быть представлен через эрмитов оператор /8/

$$W = (2\hbar)^{-1} \{p_r, \sigma\}, \quad /38a/$$

представляющий антикоммутатор радиального импульса:

$$p_r = \frac{1}{2} \{r_0, \vec{p}\}; \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}, \quad /38b/$$

со скалярной функцией $\sigma(\vec{r})$, которая взаимно-однозначно связана с функцией ЛМП - $f(\vec{r})$ посредством равенства

$$S(\sigma) = S(f) - 1; \quad S(r) = \int \frac{du}{\sigma(u, r_0)}. \quad /38в/$$

Теперь, аналогично /36/, эффективный гамильтониан $H[f]$ рассматриваемой системы в МЛМП имеет вид

$$H[f] = \sum_{i=1}^A T_f(\vec{r}_i) + \sum_{i<j}^A V_f(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \quad /39/$$

где

$$T_f(\vec{r}) = U_f^{-1}(\vec{r}) T(\vec{r}) U_f(\vec{r}); \quad V_f(\vec{r}, \vec{r}') = U_f^{-1}(\vec{r}) U_f^{-1}(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') U_f(\vec{r}') U_f(\vec{r}). \quad /39a/$$

Во вторично-квантованном виде, после введения с помощью "модельного" одночастичного базиса $\{\bar{\phi}_i\}$ операторов ядерного поля

$$\bar{\psi}^{\pm}(\vec{r}) = \sum_i a_i^{\pm} \bar{\phi}_i^*(\vec{r}), \quad \bar{\psi}(\vec{r}) = \sum_i a_i \bar{\phi}_i(\vec{r}), \quad /40/$$

эффективный гамильтониан /39/ записывается следующим образом:

$$\hat{H}[f] = \int d\vec{r} \bar{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) T_f(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \bar{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) \bar{\psi}^{\dagger}(\vec{r}') V_f(\vec{r}, \vec{r}') \bar{\psi}(\vec{r}') \bar{\psi}(\vec{r}). \quad /41/$$

Тогда, если состояние, описываемое модельной многочастичной волновой функцией $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$ в пространстве Фока, обозначим через $|- \rangle$, то для энергетического функционала /22/ получаем выражение

$$E[f] = \langle - | \hat{H}[f] | - \rangle. \quad /42/$$

По определению n -я вариация энергетического функционала $E[f]$ задается по правилу

$$\delta^{(n)} E[f] = \frac{\delta^n E[f]}{\delta f^n} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d^n E[f_\epsilon]}{d\epsilon^n}, \quad /43/$$

где $f_\epsilon(\vec{r}) = f(\vec{r}) + \epsilon \eta(\vec{r})$ обозначает произвольную вариацию функции ЛМП $f(\vec{r})$. Тогда согласно равенствам /39/-/43/, учитывая явный вид /38/ оператора \hat{U}_f^+ и линейность W относительно скалярной функции σ , из условия стационарности /23/ энергетического функционала /42/ получаем условие

$$\langle - | \int d\vec{r} \psi_f^+(\vec{r}) [\hat{h}, W] \psi_f(\vec{r}) | - \rangle = 0, \quad /44/$$

где

$$\hat{h} \equiv T(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \psi_f^+(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \psi_f(\vec{r}'). \quad /44a/$$

Символами ψ_f^+ и ψ_f обозначены операторы эффективного ядерного поля, полученные из /40/ посредством ЛМП, проведенного с помощью оператора /38/.

Для случая $A=1$ в конфигурационном пространстве уравнение /44/ имеет вид

$$\langle \phi_f | [H, W] | \phi_f \rangle = 0, \quad /45/$$

т.е. точно совпадает с сформулированной в^{9/} гипервириальной теоремой для одночастичного уравнения Шредингера. В общем случае ($A \neq 1$) уравнение /44/ представляет многочастичный аналог гипервириальной теоремы. Следовательно, в МЛМП энергия системы минимизируется в рамках фиксированной орбиты $\mathcal{O} \subset \mathcal{K}$, причем для функции основного состояния $\Psi_f \in \mathcal{O}$ в силе гипервириальная теорема с оператором W , определенным уравнением /38/.

Уравнение /44/ тождественно удовлетворяется для произвольной функции $\vec{\eta} \in \mathcal{F}$. Имея в виду явный вид оператора W , получаем в самом общем виде уравнение МЛМП:

$$\langle - | \frac{\partial \psi_f^+(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \hat{h} \psi_f(\vec{r}) - \psi_f^+(\vec{r}) \frac{\partial \hat{h}}{\partial \vec{r}} \psi_f(\vec{r}) | - \rangle = 0 \quad /46/$$

для функции ЛМП - $f(\vec{r})$.

Аналогичным способом определяется и вторая вариация $\delta^{(2)} E[f]$ энергетического функционала /42/, что дает условие минимума в МЛМП:

$$\langle - | \int d\vec{r} \psi_f^+(\vec{r}) [W, [W, \hat{h}]] \psi_f(\vec{r}) | - \rangle < 0, \quad /47/$$

где $f(\vec{r})$ - решение уравнения стационарности /46/.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из настоящей работы можно сделать следующие общие выводы. Построен МЛМП, который сводит многочастичную задачу для основного состояния квантовомеханической системы к решению одного единственного уравнения для функции ЛМП. Этот метод точен для собственной орбиты $\mathcal{O}_{НСК}$ системы с гамильтонианом H . Доказана теорема о локально-плотностном энергетическом функционале, которая в \mathcal{O}_H совпадает с известной теоремой Коона. На произвольной орбите $\mathcal{O}_{СК}$ МЛМП дает однозначно путь построения энергетического функционала $E[f]$ /соответственно $E[\rho]$ /. Показано, что уравнение стационарности $E[f]$ совпадает с гипервириальной теоремой для оператора W , которая должна удовлетворяться пробными функциями вариационного метода. Для достаточно общего вида гамильтониана H получены в явном виде уравнение стационарности и условие, при котором его решение $f(\vec{r})$ минимизирует энергию многочастичной системы.

Самая важная особенность МЛМП состоит в чрезвычайном упрощении многочастичной задачи, что достигается благодаря предварительному выбору вида "модельной" волновой функции $\Psi \in \mathcal{K}$. Так, например, в случае, когда $| - \rangle = \prod_{i=1}^A a_i^+ | 0 \rangle$, используя известные функции /скажем, функции гармонического осциллятора/ для "модельного" одночастичного базиса $\{\tilde{\phi}_i\}$, МЛМП редуцирует систему из A интегродифференциальных уравнений теории ХФ до одного уравнения для $f(\vec{r})$. Полученная таким образом информация об основном состоянии может оказаться полезной и удобной для физики тяжелых ионов и в ряде других /существенно многочастичных/ задач, где исключительно трудно прямое использование ХФ-результатов. В таком аспекте МЛМП может использоваться и в теориях Хартри-Фока-Боголюбова и др.

Полученный в результате МЛМП новый одночастичный базис $\{\phi_i[f]\}$ может с успехом быть использован в вариационном методе ХУ при расчете матричных элементов гамильтониана H , которые участвуют в диагонализации по введенным коллективным переменным.

До сих пор для описания ряда свойств ядер, не укладывающихся в рамки обычной модели оболочек, вводились феноменологические коллективные параметры, связанные с объемными характеристиками ядер: формой, размерами, плотностью. В МЛМП, в известном смысле, эти характеристики уже включены, поскольку полная волновая функция представляет функционал локальной плотности $\rho(\vec{r})$. Это дает возможность построить единую модель независимых частиц^{10/}, - единую в том смысле, что открывается возможность единого описания одночастичных и коллективных свойств ядер.

В случае когда "модельная" плотность $\bar{\rho}(\vec{r})$ представляет медленно изменяющуюся функцию своих аргументов и ее можно за-

менить постоянной ρ_0 , уравнение /32/ допускает аналитическое решение: $f(\vec{r}) = \left\{ 3 \rho_0^{-1} \int_0^r \rho u^2 du \right\}^{1/3}$. Полученная таким образом в МЛМП явная локально-плотностная формулировка может быть использована для построения обобщенного метода ТФ /11/ для конечных ферми-систем.

Представляет интерес обобщение МЛМП с помощью перехода к функции ЛМП $f(\vec{r}, t)$, зависящей и от времени t , что расширило бы его приложимость и на область временизависящих процессов в многочастичных системах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мессиа А. Квантовая механика. "Наука", М., 1979, т.2, с.254.
2. Hohenberg P., Kohn W. Phys.Rev., 1964, B136, p.864.
3. Brueckner K.A. et al. Phys.Rev., 1968, 171, p.1188; Lombard K.A. Ann.Phys., 1973, 77, p.380; Stock H. Nucl. Phys., 1975, A237, p.365; Holzwarth G., Eckart G. Z.Phys., 1977, A281, p.385.
4. De Witt B.S. Rev.Mod.Phys., 1957, 29, p.377; Phys.Rev., 1952, 85, p.653; Nakai Sh. Progr.Theor.Phys., 1955, 13, p.380.
5. Bell J.S. In: Lecture Notes on the Many Body Problem from the First Bergen International School of Physics. N.Y., 1961, p.214; Eger F., Gross E. Ann.Phys., 1963, 24, p.63; Gross E.P. In: Mathematical Methods in Solid State and Superfluid Theory. N.Y., 1968, p.46.
6. Eger F.M., Gross E.P. Nuovo Cimento, 1964, 34, p.1225; J.Math.Phys., 1965, 6, p.891; J.Math.Phys., 1966, 7, p.578; Gross E.P. Ann.Phys., 1971, 62, p.320; Witriol N.M. J.Math.Phys., 1970, 11, p.669; ibid., 1971, 12, p.177; ibid., 1971, 12, p.2467; McMachan A.K. J.Low Temp.Phys., 1972, 8, p.159; Trickey S.B. et al. Phys.Rev., 1973, A7, p.1662.
7. Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. "Наука", М., 1970.
8. Epstein S.T., Hirschfelder J.O. Phys.Rev., 1961, 123, p.1495.
9. Hirschfelder J.O. J.Chem.Phys., 1960, 33, p.1462.
10. Петков И.Ж., Стоицов М.В. Доклады БАН, 1980, 33, с.1623.
11. Petkov I.Zh., Stoitsov M.V. ICTP, IC/80/34, Trieste, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 мая 1982 года.

Петков И.Ж., Стоицов М.В.

P4-82-349

Метод локально-масштабного преобразования для основного состояния многочастичных систем

Построен вариационный метод, который сводит решение многочастичной задачи для основного состояния квантовомеханической системы к решению одного уравнения для функции локально-масштабного преобразования. Доказана теорема о локально-плотностном энергетическом функционале, что является строгим обоснованием широко используемого метода функционала плотности. Для случая, когда гамильтониан системы имеет достаточно общий вид, получено в явном виде уравнение стационарности и условие, при котором его решение минимизирует энергию системы. Обсуждается возможность практического применения метода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Petkov I.Zh., Stoitsov M.V.

P4-82-349

Local Scale Transformation Method for the Ground State of Many-Particle Systems

A variational method is proposed, which reduces the solution of the problem for the ground state of a many-particle quantum-mechanical system to the solution of a single equation for the function of local scale transformation. The theorem for the local-density energy functional is proved, which provides a rigorous ground for the widely used density functional method. For the Hamiltonian of the system having sufficiently general form we have explicitly obtained the stationarity equation and the condition, under which its solution minimizes the energy of the system. The possibilities for practical applications of the method are discussed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой