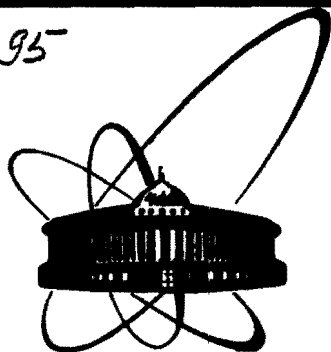


П 295



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P4-86-273

И.Ж.Петков, М.В.Стоицов*

**ФУНКЦИОНАЛ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ
В МЕТОДЕ ЛОКАЛЬНО-МАСШТАБНЫХ
ПРЕОБРАЗОВАНИЙ**

* Институт ядерных исследований
и ядерной энергетики БАН, София

1986

1. Введение

В данной работе обсуждается функционал плотности энергии /ФПЭ/, построенный с помощью метода локально-масштабных преобразований /МЛМП/. Волновая функция многочастичной системы в МЛМП определяется^{/1,2/} унитарным преобразованием над функцией, задающей орбиту в гильбертовом пространстве. Поскольку преобразование однозначно связано с локальной плотностью частиц^{/2/}, волновая функция, энергия основного состояния и все искомые наблюдаемые становятся функционалами плотности. Так как орбита не фиксирована, то вид функционалов является универсальным т.е. сохраняется для любой/в т.ч. и собственной/ орбиты. Таким образом, как вариационный метод, так и вариационный принцип Шредингера формулируются в терминах локальной плотности. Функционал плотности кинетической энергии представляется двумя слагаемыми: первое из них $\tilde{\tau}_w[\rho]$ совпадает с градиентной поправкой Вайцзекера^{/3/}, а второе $\tilde{\tau}_{\text{тф}}[\rho]$ имеет вид плотности кинетической энергии Томаса-Ферми и точно совпадает с ней для бесконечно протяженных систем^{/4/}. Асимптотическое поведение плотности $g(\vec{r})$ полностью определяется градиентным членом $\tilde{\tau}_w[\rho] \sim (\nabla \rho)^2 / \rho$ с помощью вариационного уравнения Эйлера-Лагранжа. Поскольку представление плотности кинетической энергии является точным, то в данной нерелятивистской локально-плотностной формулировке теории не представляется возможным введение других градиентных поправок, которые могли бы изменить асимптотику плотности $g(\vec{r})$. Вопрос о введении градиентных поправок здесь рассмотрен с помощью минимальной $\frac{v^2}{c^2}$ -релятивизации теории. Оказывается, что возникающие градиентные слагаемые приводят только к $\frac{v^2}{c^2}$ -поправке в энергии отделения частицы $E_F = E_F^{\text{нр.}} + O(\frac{v^2}{c^2})$.

Приведенная здесь локально-плотностная формулировка метода функционала плотности энергии /ФПЭ/ имеет место и для случая, когда орбита Ψ составлена из одночастичных функций в виде детерминанта Слэтера. Тогда МПЭ естественным образом связывается с методом Хартри-Фока, причем, в принципе, может точно воспроизводить его результаты. Численные расчеты с Ψ , образованной из осцилляторных функций, были проделаны в работе^{/5/}, где показано, что даже для ^{208}Pb расчетные ядерные характеристики МПЭ мало отличаются от полученных точным методом ХФ. Для сравнения отметим, что предлагаемые до сих пор феноменологические^{/6/} или квазиклассические^{/7/} функционалы непригодны при попытке воспроизвести хартри-фокские результаты, в частности, вообще нельзя определить одночастичные ядерные характеристики.

В излагаемом здесь локально-плотностном варианте метода ХФ/ЛПХФ/ отмеченная выше структура плотности кинетической энергии сохраняется,

причем оказывается возможным сделать некоторые общие заключения. Для ядер $1s$ -оболочки слагаемое $\tilde{\tau}_{\text{TF}}[\rho]$ зануляется и остается только градиентный член $\tau_w[\rho]$. Для бесконечных систем зануляется градиентный член и остается только $\tilde{\tau}_{\text{TF}}[\rho]$, который принимает вид плотности энергии Томаса-Ферми $\sim \rho^{5/3}$. Учет минимального релятивизма в ЛПХФ не вносит принципиальных изменений за исключением случая ядер $1s$ -оболочки. Здесь плотность кинетической энергии на малых расстояниях $r \leq 0,225 \text{ fm}$ становится отрицательной, что свидетельствует о неприменимости метода ХФ с $\frac{\hbar^2}{2m}$ -поправками к этим ядрам.

2. Основные положения МЛМП

Волновая функция в МЛМП /2/

$$\Psi_{\mathcal{F}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = \int_{\mathcal{F}} \left[\frac{f(\vec{r})}{r^2} \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial r} \right]^{1/2} \bar{\Psi}(\vec{f}(\vec{r}_1), \vec{f}(\vec{r}_2), \dots, \vec{f}(\vec{r}_A)), \quad /1/$$

где $\bar{\Psi}$ - заданная многочастичная функция, $\vec{f}(\vec{r}) = \hat{r} f(\vec{r})$ - функция преобразования, являющаяся элементом группы локально-масштабных преобразований \mathcal{F} /т.е. $f \in \mathcal{F}$ /. Групповое свойство таких координатных преобразований $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \hat{r} f(\vec{r})$ /обеспечивается требованием

$$D(\vec{r}) \equiv D(f_x, f_y, f_z) / D(x, y, z) = \frac{f^2(\vec{r})}{r^2} \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial r} \neq 0. \quad /2/$$

Совокупность функций $\Psi_{\mathcal{F}}$ при заданной $\bar{\Psi}$ и всевозможных $f \in \mathcal{F}$, удовлетворяющих условию /2/, формируют орбиту в пространстве функций \mathcal{H}^A :

$$O_{\bar{\Psi}} = \{ \Psi_{\mathcal{F}}; f \in \mathcal{F} \}. \quad /3/$$

Собственная орбита определяется как

$$O_H = \{ \Psi_{f_0}, \Psi_{f_0}; f \in \mathcal{F} \}, \quad /4/$$

где для $f_0 \in \mathcal{F}$ функция Ψ_{f_0} является точной функцией системы, гамильтониан которой $H : H\Psi_{f_0} = E_0\Psi_{f_0}$.

Из определения /1/ следует основное уравнение МЛМП

$$\rho_f(\vec{r}) = \frac{f^2(\vec{r})}{r^2} \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial r} \bar{\rho}(\vec{f}). \quad /5/$$

Здесь $\rho_f(\vec{r})$ и $\bar{\rho}(\vec{f})$ - распределения плотности частиц, соответствующих функциям $\Psi_{\mathcal{F}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$ и $\bar{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$. Ур. /5/ как нелинейное уравнение первого порядка для функции $f(\vec{r})$ устанавливает однозначное соответствие между искомой плотностью $\rho_f(\vec{r})$ и $f(\vec{r})$. Таким образом многочастичную функцию /1/ можно рассматривать как функционал плотности $\rho = \rho_f$:

$$\Psi_{\mathcal{F}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \rightarrow \Psi(r_1, r_2, \dots, r_A; [\rho]) \equiv \Psi[\rho]. \quad /6/$$

Вариационный принцип Шредингера формулируется следующим образом:

$$E_0 = \min_{\Psi \in \mathcal{H}^A} \left\{ \min_{f \in \mathcal{F}} \langle \Psi_f | H | \Psi_f \rangle \right\}. \quad /7/$$

Выражение в фигурных скобках

$$\langle E[\rho] \rangle \equiv \langle \Psi_f | H | \Psi_f \rangle = \langle \Psi[\rho] | H | \Psi[\rho] \rangle \equiv E[\rho] \quad /8/$$

для собственной орбиты $O_H \subset \mathcal{H}^A$ при варьировании по $\rho(\vec{r})$ /при условии

$\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = A$, A - число частиц / приводит к уравнению Эйлера-Лагранжа:

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} = 0. \quad /9/$$

Решение ур. /9/ соответствует решению точной многочастичной шредингеровской задачи основного состояния, причем имеют место следующие неравенства:

$$\bar{E} > E_{f_0} \geq E_{f_0} \equiv E_0, \quad /10/$$

где E_{f_0} - минимальная энергия в собственной орбите, E_{f_0} - среднее значение H для произвольной функции $\Psi_f \in O_H$. Энергия \bar{E} соответствует произвольной орбите $O \subset \mathcal{H}^A$, за исключением точной $O_H \subset \mathcal{H}^A$.

3. Плотность кинетической энергии

С помощью волновой функции $\Psi[\rho]$ в собственной орбите можно найти точное выражение для плотности кинетической энергии $\tau[\rho]$ как функционал локальной плотности:

$$\tau[\rho] = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla_{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{r}} \rho(\vec{r}, \vec{r}; [\rho]) \right]_{\vec{r}=\vec{r}}, \quad /11/$$

где

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}; [\rho]) = A \int \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; [\rho]) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; [\rho]) d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A, \quad /12/$$

одночастичная матрица плотности.

Для дальнейшего рассмотрения удобно представить /11/ в следующем виде:

$$\tau[\rho] \equiv \tau_w[\rho] + \tilde{\tau}_{\text{TF}}[\rho] = \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \rho(\vec{r}) \left[\nabla_{\vec{r}} \cdot \nabla_{\vec{r}} \frac{\bar{\rho}(\vec{f}, \vec{f})}{\bar{\rho}(\vec{f}) \bar{\rho}(\vec{f})} \right]_{\vec{r}=\vec{r}}. \quad /13/$$

Это выражение, которое точно следует из /11/ и /12/ с учетом явного выражения для $\Psi(r_1, \dots, r_A; [\rho])$ из /6/, примечательно тем, что дает возможность установить связь с предлагаемыми ранее /6,7/ феноменологическими или квазиклассическими выражениями.

Как видно, первое слагаемое в /13/ совпадает с поправкой Вайцеккера /термин "поправка" относительно первого члена ур. /13/ здесь явно неудачен/, содержит только вариационную переменную $\rho(\vec{r})$ и не зависит от выбора орбиты. Второе слагаемое - "обобщенное" выражение для плотности кинетической энергии Томаса-Ферми - зависит от выбора орбиты, и для орбиты в виде детерминанта из плоских волн при $A \rightarrow \infty$ точно переходит в нее. В этом случае $A \rightarrow \infty$ / первый член в /13/ исчезает и

$$\tau[\rho] \rightarrow \frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{3n^2}{2} \right)^{2/3} \rho^{5/3} \equiv \tau_{\text{TF}}[\rho]. \quad /14/$$

Дальнейший анализ плотности $\tau[\rho]$ ур. /13/ удобно провести для орбиты, построенной на однодетерминантной слэтеровской функции

$$\bar{\Psi}(r_1, r_2, \dots, r_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \{ \bar{\psi}_i(\vec{r}_j) \}, \quad (i, j = 1, 2, \dots, A), \quad /15/$$

где $\bar{\psi}_i$ - одночастичные функции. В этом случае общая структура ур. /13/ такая же, а явный вид $\tilde{\tau}_{\text{TF}}[\rho]$ следующий:

$$\tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi}[P] = \frac{\hbar^2}{2M} P(\vec{r}) \sum_{i=1}^A \left[\nabla \left(\frac{\varphi_i(\vec{r})}{\sqrt{\rho(\vec{r})}} \right) \right]^2 \quad /16/$$

Для ядер 18 -оболочки выражения в круглых скобках ур./16/ равно единице, поэтому $\tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi}[P] \equiv 0$. Кинетическая энергия таких ядер в этом локально-плотностном методе ХФ является явным функционалом плотности и ее градиента:

$$T_{кин}[P] = \frac{\hbar^2}{8M} \int \frac{(\nabla P)^2}{\rho} d\vec{r} \quad /17/$$

Наличие модельных одночастичных функций в /16/ имеет принципиальное значение, так как с ними связана возможность метода воспроизводить оболочечную структуру ядер.

4. Полная энергия и уравнение Эйлера-Лагранжа

В качестве энергии взаимодействия частиц возьмем выражение

$$V[\rho] = \int W(\rho) \rho d\vec{r} + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' g_0(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') [P(\vec{r}) - P(\vec{r}')] - \frac{3}{10M} \left(\frac{\hbar^2}{2} \right)^{2/3} \int \rho^{5/3} d\vec{r}, \quad /18/$$

которое рассматривалось Бете^{/9/} при его попытке построить теорию Томаса-Ферми для ядер. Здесь $W(\rho)$ - энергия на нуклон в ядерной материи с плотностью ρ , $g_0(\vec{r}, \vec{r}')$ - дальнедействующая часть взаимодействия между частицами. В этом случае полная энергия определяется как

$$E[\rho] = T[\rho] + V[\rho] = \int \mathcal{E}_w d\vec{r} + \int [\tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi} - \mathcal{E}_{T\Phi}] d\vec{r} + \int W(\rho) \rho d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint d\vec{r} d\vec{r}' g_0(\vec{r}, \vec{r}') [P(\vec{r}) - P(\vec{r}')] \rho(\vec{r}), \quad /19/$$

Отметим, что при постоянной плотности $\rho(\vec{r}) \rightarrow \rho_0 = \text{const}$, $\mathcal{E}_w[\rho_0] = 0$, $\tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi} - \mathcal{E}_{T\Phi} = 0$ /в смысле ур./14//, $\iint g_0(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') [P(\vec{r}) - P(\vec{r}')] d\vec{r} d\vec{r}' = 0$, т.е. остается только третий член, который приводится в теории ядерной материи.

Варируя /19/ по $P(\vec{r})$, при учете нормировки плотности получим уравнение Эйлера-Лагранжа

$$-\frac{\hbar^2}{4M} \Delta P + \frac{\hbar^2}{8M} \frac{(\nabla P)^2}{\rho} + [U_{T\Phi} - U_{T\Phi} + \mu(P) + U_b(P)] P(\vec{r}) = E_F P(\vec{r}), \quad /20/$$

где $\mu(P) = d(PW)/dP$ - химический потенциал, $U_{T\Phi} = d\tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi}/dP$, $\tilde{U}_{T\Phi} = d\tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi}/dP$, E_F - множитель Лагранжа, $U_b(P) = \int g_0(\vec{r}, \vec{r}') [P(\vec{r}) - P(\vec{r}')] d\vec{r}'$. Ур./20/ можно сравнить с уравнением, полученным Бете^{/9/}:

$$\mu(P) + U_b(P) = E_F. \quad /21/$$

В областях, где $\rho \rightarrow 0$, выражение в средних скобках /ур./20//, умноженное на $P(\vec{r})$, исчезает, так что получается дифференциальное уравнение

$$2\Delta P - \frac{(\nabla P)^2}{\rho} = -\frac{8M}{\hbar^2} E_F P(\vec{r}), \quad /22/$$

которое удовлетворяется при $P(r) \sim \exp(-\lambda r)$, причем

$$\lambda^2 = -\frac{8M}{\hbar^2} E_F; \quad E_F < 0. \quad /23/$$

$$\text{При } r \rightarrow 0: \quad P(r)_{r \rightarrow 0} = C_1 + C_2 r^2. \quad /24/$$

Таким образом, вариационное уравнение /20/ имеет непрерывное решение во всем пространстве, и плотность обладает правильной экспоненциальной асимптотикой /что нельзя утверждать об ур./21/, см. по этому поводу работу^{/9/}.

5. Учет минимального релятивизма

Как видно, в излагаемом нами подходе не возникает специфических трудностей с градиентными поправками, которые встречаются в других методах, например в расширенном методе Томаса-Ферми^{/7/}. В принципе здесь также могут возникнуть дополнительные градиентные слагаемые, но только в рамках допустимой $\frac{v^2}{c^2}$ -релятивизации теории.

Известно, что в v^2/c^2 -приближении последовательное одночастичное описание не нарушается: к оператору $\hat{p}^2/2M$ добавляется релятивистская поправка $-\hat{p}^4/8M^3c^2$. Возникающие другие поправки того же порядка, содержащие взаимодействия, мы здесь не рассматриваем. С учетом оператора $-\hat{p}^4/8M^3c^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} g \nabla^2 \nabla^2$, $g = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar c}{Mc^2} \right)^2 \approx 0,01 \text{ fm}^2$, полная кинетическая энергия системы частиц получается в виде

$$T = \frac{\hbar^2}{2M} \int [\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_2] d\vec{r}, \quad /25/$$

где

$$\mathcal{E}_0(\vec{r}) = -\lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{r}'} \left[\nabla^2 \rho(\vec{r}, \vec{r}') \right], \quad /26/$$

$$\mathcal{E}_2(\vec{r}) = -g \lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{r}'} \left[\nabla^2 \nabla^2 \rho(\vec{r}, \vec{r}') \right]. \quad /27/$$

Используя определение /12/ для одночастичной матрицы плотности в МЛМП, получаем следующее выражение для плотности кинетической энергии:

$$\mathcal{E}[P] = \mathcal{E}_w[P] + \tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi}[P] = \mathcal{E}_{0w} + \mathcal{E}_{1w} + \tilde{\mathcal{E}}_{0T\Phi} + \tilde{\mathcal{E}}_{1T\Phi}, \quad /28/$$

$$\mathcal{E}_{0T\Phi} = \frac{1}{4} \frac{(\nabla P)^2}{\rho}, \quad /28a/$$

$$\mathcal{E}_{1w} = -g \left[\frac{1}{4} \frac{(\Delta P)^2}{\rho} + \frac{1}{16} \frac{(\nabla P)^4}{\rho^3} - \frac{1}{4} \frac{(\Delta P)(\nabla P)^2}{\rho^2} \right]. \quad /28b/$$

Выражение для кинетической энергии $\tilde{\mathcal{E}}_{0T\Phi}$ /13//, /16/ и релятивистская поправка к нему $\tilde{\mathcal{E}}_{1T\Phi}$ содержат $P(\vec{r})$, функцию $\bar{P}(\vec{r}, \vec{r}')/\sqrt{P(\vec{r})P(\vec{r}'')}$, их градиенты, а соответствующие им члены в уравнении Эйлера-Лагранжа достаточно быстро исчезают на бесконечности. Поэтому $\tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi} = \tilde{\mathcal{E}}_{0T\Phi} + \tilde{\mathcal{E}}_{1T\Phi}$ не может привести к нарушению асимптотики плотности $\rho(\vec{r})$. Изменения возможны только за счет поправки \mathcal{E}_{1w} к кинетической энергии \mathcal{E}_{0w} .

Анализ уравнения Эйлера-Лагранжа

$$\frac{\delta}{\delta P} \int [\mathcal{E}_w[\rho] + \tilde{\mathcal{E}}_{T\Phi}[P] + V_{пот}[\rho] - E_F \rho] d\vec{r} = 0 \quad /29/$$

при $r \rightarrow \infty$ с учетом /28b/ показывает, что плотность имеет асимптотику

$$\rho(r) \sim \exp(-\kappa r). \quad /30/$$

Параметр κ является положительным корнем уравнения

$$\kappa^4 + \frac{1}{g} \kappa^2 + \frac{32M}{\hbar^2} E_F = 0, \quad /31/$$

т.е.

$$\kappa^2 = -\frac{2}{\eta} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{8ME_F}{\hbar^2} \eta \right)^2} \right] \quad /32/$$

или приближенно

$$\kappa_1^2 = -\frac{8M}{\hbar^2} E_F - \frac{1}{4} \left(\frac{8M}{\hbar^2} E_F \right)^2 \eta + O(\eta^2). \quad /33/$$

Таким образом, видно, что $\frac{v^2}{c^2}$ -приближение не меняет существенно асимптотику $\rho(\vec{r})$ и приводит только к небольшой поправке в экспоненциальном спаде плотности на бесконечности.

Анализ уравнения /29/ при $v \rightarrow 0$ показывает, что плотность является ограниченной: $\rho(v) \xrightarrow{v \rightarrow 0} \rho_0 = \text{const.}$

Отметим, что выражение для $\tilde{\mathcal{E}}_w$ при небольших v имеет поведение

$$\tilde{\mathcal{E}}_w(v \rightarrow 0) = \frac{\hbar^2}{8M} \left[\frac{\rho''(0)}{\rho(0)} \right]^2 \rho_0 (v^2 - 5\eta) \quad /34/$$

и принимает отрицательные значения в области $v \leq v_1 = \sqrt{5\eta} \approx 0,225c$. Эта особенность $\tilde{\mathcal{E}}_w$ при $v \leq v_1$, которая является следствием введенной $\frac{v^2}{c^2}$ -поправки в кинетическую энергию, не должна существенно сказываться на полной кинетической энергии, так как имеется большой положительный вклад от слагаемого $\tilde{\mathcal{E}}_{TF}[\rho]$. Однако отметим, что, вообще говоря, это утверждение является модельнозависимым. Так, в приближении Хартри-Фока в случае легких ядер $1s$ -оболочки слагаемое $\tilde{\mathcal{E}}_{TF}$ в точности зануляется, что видно из /16/. Тогда напрашивается вывод о том, что, поскольку для таких ядер в ХФ-приближении сохраняется только градиентная плотность $\tilde{\mathcal{E}}_w[\rho]$, такое приближение становится непригодным для описания ядер $1s$ -оболочки, т.е. по необходимости следует применять методы, выходящие за рамки приближения ХФ.

6. Заключение

Приведем коротко основные результаты работы.

1. В рамках МЛМП получено универсальное выражение для плотности кинетической энергии, имеющее форму функционала плотности от $\rho(\vec{r})$. В нерелятивистском случае функционал состоит из двух слагаемых. Первое, $\tilde{\mathcal{E}}_w[\rho]$, известно как поправка Вайцзеккера. Оно определяет правильную асимптотику плотности. Второе слагаемое $\tilde{\mathcal{E}}_{TF}[\rho]$ — обобщенное выражение для кинетической энергии Томаса-Ферми, которое при $A \rightarrow \infty$ точно воспроизводит его; $\tilde{\mathcal{E}}_{TF}[\rho] \rightarrow \tilde{\mathcal{E}}_{TF}[\rho] = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{1/3} \rho^{5/3}$.

2. Полная энергия системы в случае эффективных сил, зависящих от плотности, представляется как явный функционал плотности $E[\rho]$. В отличие от других подходов, использующих различные функционалы, здесь содержатся в принципе точные /в смысле метода ХФ/ оболочечные эффекты.

3. Численные расчеты с предлагаемым функционалом весьма просты, а результаты практически точно воспроизводят те, которые получаются точным методом ХФ с теми же эффективными силами.

4. Исследованы градиентные $\frac{v^2}{c^2}$ -поправки к кинетической энергии. В этом приближении основной градиентный член приобретает вид $\tilde{\mathcal{E}}_{ow} + \tilde{\mathcal{E}}_{lw}$. Остальные градиентные слагаемые не изменяют экспоненциального характера асимптотики локальной плотности.

5. Для ядер $1s$ -оболочки функционал $\tilde{\mathcal{E}}_{TF}[\rho]$ в приближении ХФ в точности зануляется. Плотность кинетической энергии $\tilde{\mathcal{E}}_{ow} + \tilde{\mathcal{E}}_{lw}$ при $v \rightarrow 0$ принимает нефизические значения: $\tilde{\mathcal{E}}_w(v \leq v_1) < 0$. Таким образом, видно, что учет $\frac{v^2}{c^2}$ -поправок приводит к выводу о неприменимости метода ХФ к легким ядрам $1s$ -оболочки. Этот вывод качественно согласуется с результатами для весовой функции основного состояния в методе генераторной координаты /10/, полученными для ядра ${}^4\text{He}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Петков И.Ж., Стоицов М.В. Доклады БАН, София, 1981, 34, с.1657.
2. Петков И.Ж., Стоицов М.В. ОИЯИ, Р4-82-349, Дубна, 1982; Теор. мат. физ., 1983, 55, с.407.
3. Weizsäcker C. F., Z. Phys. 1935, 96, p.431.
4. Petkov I. Zh., Stoitsov M. V. ICTP, IC/80/34, Trieste, 1980.
5. Петков И.Ж., Стоицов М.В. ОИЯИ, Р4-82-385, Дубна, 1982; ЯФ, 1983, 37, с.1167.
6. Lombard R. J., Ann. Phys. 1973, 77, p.380.
7. Brack M., Guet C., Nakansson H., Phys. Rep., 1985, 123, p.275.
8. Крячко Е.С., Петков И.Ж., Стоицов М.В. ИТФ-84-108Р, Киев, 1984.
9. Bete H. A., "Theory of Nuclear Matter", Ann. Rev. Nucl. Sci., 1971, 21, p.93.
10. Петков И.Ж., Стоицов М.В. ОИЯИ, Р4-85-785, Дубна, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 апреля 1986 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
D1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
D17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
D10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
D4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Петков И.Ж., Стоицов М.В.

P4-86-273

Функционал плотности энергии
в методе локально-масштабных преобразований

Приводится локально-плотностная формулировка метода локально-масштабных преобразований. Функционал плотности кинетической энергии представляется двумя слагаемыми: первое из них совпадает с градиентной поправкой Вайцзеккера, а второе имеет вид плотности кинетической энергии Томаса - Ферми и точно совпадает с ней для бесконечно протяженных систем. Обсуждается вопрос о градиентных поправках, возникающих вследствие учета минимального v^2/c^2 -релятивизма. Показано, что приближение Хартри - Фока становится непригодным для описания ядер $1s$ -оболочки, и необходимо применить методы, выходящие за рамки приближения Хартри - Фока.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Petkov I.Zh., Stoitsov M.V.

P4-86-273

Energy Density Functional
within the Local-Scale Transformation Method

A local density formulation of the local-scale transformation method is given. The obtained kinetic energy density consists of two terms: the so-called Weizsäcker correction term and the Thomas - Fermi like kinetic energy density term. The latter is an exact expression for an infinite nuclear matter system. The problem of the gradient corrections to the kinetic energy density is considered which appear as a result of introducing of v^2/c^2 -relativistic corrections. It is shown that the Hartree - Fock approximation becomes ineffective for describing the four nucleon $1s$ -shell nuclei. Therefore the methods going beyond the Hartree - Fock one should be used in these cases.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986