

где  $+\psi_e(x)$  удовлетворяет граничным условиям (27) и (14) ( $\psi_+ \rightarrow \psi_e$ ),  $\psi_0(x)$  — условиям (20) и (19). Продолжением решения (52) на полуось  $x < 0$  будет функция

$$-\psi(x) = c_+ - \psi_e(x) + c_- \psi_0(x), \quad (53)$$

где  $\psi_0(x)$  по-прежнему удовлетворяет условиям (20), (19), а локально-четная функция  $-\psi_e(x)$  — условию (14) и условию

$$\lim_{x \rightarrow -0} (-\psi_e(x) + \mathcal{P}_v(\lambda, |x|)) = -h(\lambda, v). \quad (54)$$

Правило (52) — (54) легко обобщается на случай несимметрично-го сингулярного потенциала

$$W(x) = \begin{cases} \lambda_+ x^{-\nu_+}, & x > 0, \\ \lambda_- |x|^{-\nu_-}, & x < 0, \end{cases} \quad (55)$$

заменой в условии (54)  $\lambda \rightarrow \lambda_-$ ,  $v \rightarrow v_-$ . Правило действует и в обратную сторону.

Сформулированные правила обеспечивают самосопряженность гамильтониана (2) на функциях с особенностями логарифмической производной при  $x \rightarrow 0$  (27), (54), так как в дополнение к сингулярности (55) подключается точечный потенциал

$$V_\delta = (\mathcal{P}_{\nu_+}(\lambda_+, |x|) + \mathcal{P}_{\nu_-}(\lambda_-, |x|) + h(\lambda_+, \nu_+) + h(\lambda_-, \nu_-)) \delta(x). \quad (56)$$

Эти же правила позволяют непротиворечиво решить любую задачу одномерной квантовой механики с особенностью потенциала (1) (уровни энергии, прохождение через барьер), в том числе обратную задачу [5]. Примеры будут рассмотрены в отдельной публикации.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1989.  
 [2] Переломов А. М. Обобщенные когерентные состояния и их приложения. М., 1987. [3] Dittrich J., Ehneg P. // J. Math. Phys. 1985. 28. P. 2000. [4] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4. М., 1982. [5] Гостев В. Б., Френкин А. Р. // ТМФ. 1991. 88. С. 37. [6] Гостев В. Б., Минеев В. С., Френкин А. Р. // ТМФ. 1986. 68. С. 45. [7] Moss R. E. // Amer. J. Phys. 1987. 55. P. 397. [8] Малкин А., Манько В. Н. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М., 1979. [9] Loudon P. // Amer. J. Phys. 1959. 27. P. 649. [10] Calodgero F. // J. Math. Phys. 1969. 10. P. 2191. [11] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 2. М., 1980. [12] Klauder J. // Acta Phys. Austriaca Suppl. 1973. 11. P. 341. [13] Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. Т. 2. М., 1960. [14] Ezawa H., Klauder J., Shepp L. // J. Math. Phys. 1975. 16. P. 783. [15] Гостев В. Б., Френкин А. Р. // ТМФ. 1988. 74. С. 247. [16] Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М., 1969.

Поступила в редакцию  
24.06.93

УДК 539.19+539.2

### ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРЕМА ХОЭНБЕРГА—КОНА В МЕТОДЕ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ПЛОТНОСТИ

О. С. Еркович, В. В. Комаров, А. М. Попова, В. А. Борзилов  
(НИИЯФ)

Сформулирована и доказана обобщенная теорема Хоэнберга—Кона, лежащая в основе метода многочастичных функционалов плотности. Предлагаемый метод является обобщением метода функционалов плотности и основан на представлении энер-

гии системы как функционала диагонального элемента многочастичной матрицы плотности. При этом обменно-корреляционные эффекты учитываются в рассмотрении без включения в модель дополнительных предположений относительно свойств этих эффектов.

1. Метод функционалов плотности, позволяющий представить основные характеристики многочастичных систем в виде однозначных функционалов плотности частиц, является одним из наиболее перспективных направлений развития квантовой теории систем многих частиц. В основе этого подхода лежит теорема Хоэнберга—Кона, утверждающая, что полная энергия основного состояния ферми-системы представляет собой однозначный функционал плотности частиц, минимум которого достигается на функции плотности  $n(r)$ , соответствующей истинному распределению частиц в системе [1—3]. Наиболее существенные трудности в этом подходе возникают при описании обменных и корреляционных эффектов, которое осуществляется путем введения в выражение для функционала полной энергии  $E[n]$  дополнительных слагаемых, зависящих от  $n(r)$  и ее производных, и не всегда оказывается успешным [1, 3]. В том случае, когда именно обмен и корреляция определяют свойства изучаемого объекта, оказывается полезным метод многочастичных функционалов плотности, представляющий собой обобщение метода функционалов плотности. В этом подходе учет многочастичных корреляций осуществляется в значительно более простой и полной форме, чем в традиционном, за счет того, что в качестве основной величины, характеризующей систему, выбирается диагональный элемент  $m$ -частичной матрицы плотности. Этот подход позволил получить хорошее согласие с экспериментальными данными при описании поверхностей металлов и систем типа металл—адсорбат [4—6]. Настоящая работа посвящена изложению обобщенной теоремы Хоэнберга—Кона, лежащей в основе метода многочастичных функционалов плотности.

2. Рассмотрим систему  $N$  тождественных нерелятивистских фермионов, описываемую не зависящим от времени и спинов частиц гамильтонианом

$$H = T + V + W, \\ T = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \Delta_i \right), \quad V = \sum_{i=1}^N V(r_i), \quad W = \sum_{i < j=2}^N W(r_i, r_j), \quad (1)$$

где  $(-1/2)\Delta_i$  — оператор кинетической энергии  $i$ -й частицы, потенциалы  $V(r_i)$  и  $W(r_i, r_j)$  описывают соответственно взаимодействие частицы  $i$  с внешним полем и частиц  $i$  и  $j$  между собой;  $r_i$  — радиус-вектор  $i$ -й частицы.

Введем множество  $N$ -частичных гамильтонианов  $\mathcal{H}_N$  вида (1) таких, что решение задачи на собственные значения

$$H |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle, \quad H \in \mathcal{H}_N,$$

приводит к невырожденному основному состоянию:

$$H |\psi\rangle = E_{gs} |\psi\rangle, \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Путем решения стационарного уравнения Шрёдингера для различных  $H \in \mathcal{H}_N$  можно составить множество волновых функций основных состояний  $\Psi$  и определить отображение  $C: \mathcal{H}_N \rightarrow \Psi$ . Очевидно, что отображение  $C$  однозначно по построению и множество  $\Psi$  не содержит ни одного элемента, не соответствующего какому-либо элементу из  $\mathcal{H}_N$ .

Далее, для всех волновых функций  $|\psi\rangle \in \Psi$  определим диагональный элемент не зависящей от спина матрицы плотности порядка  $m$ :

$$n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) = C_N^m \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \int d\mathbf{r}_{m+1} \dots d\mathbf{r}_N |\psi\rangle \langle \psi|,$$

$$C_N^m = N!/[m!(N-m)!], \quad m \leq N, \quad (2)$$

где  $\sigma_i$  — совокупность спиновых и изоспиновых координат  $i$ -й частицы.

Определенное таким образом отображение  $D_m: \Psi \rightarrow \mathcal{N}_m$ , где  $\mathcal{N}_m$  — множество всех  $n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$ , определенных соотношением (2), однозначно по построению;  $\mathcal{N}_m$  не содержит ни одного элемента, не соответствующего какому-либо элементу из  $\Psi$ .

Отображение  $C^{-1}$  является однозначным, поскольку гамильтонианы  $H$  и  $H'$ ,  $H \in \mathcal{H}_N$ ,  $H' \in \mathcal{H}_N$ , различающиеся более чем на аддитивную константу, всегда приводят к различным основным состояниям  $|\psi\rangle$  и  $|\psi'\rangle$ . Действительно, уравнения Шрёдингера для систем с гамильтонианами  $H = T + V + W$  и  $H' = T + V' + W'$ ,  $H \in \mathcal{H}_N$ ,  $H' \in \mathcal{H}_N$ , где  $V = \sum_{i=1}^N V'(\mathbf{r}_i)$ ,  $W = \sum_{i < j=2}^N W'(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ , имеют вид

$$(T + V + W) |\psi\rangle = E_{gs} |\psi\rangle, \quad (3)$$

$$(T + V' + W') |\psi'\rangle = E'_{gs} |\psi'\rangle. \quad (4)$$

Предполагая, что  $|\psi'\rangle = |\psi\rangle$ , и вычитая (4) из (3), приходим к соотношению

$$(V + W - V' - W') |\psi\rangle = (E_{gs} - E'_{gs}) |\psi\rangle. \quad (5)$$

Поскольку в координатном представлении операторы  $V$ ,  $V'$ ,  $W$  и  $W'$  являются операторами умножения функции  $|\psi\rangle$  на функцию координат, соотношение (5) приводит к соотношению между гамильтонианами  $H' = H + (E'_{gs} - E_{gs})$ , противоречащему утверждению, что  $H'$  и  $H$  различаются более чем на аддитивную константу.

Покажем, что отображение  $D_m^{-1}$  также является однозначным, т. е. что различным волновым функциям  $|\psi\rangle$  и  $|\psi'\rangle$  соответствуют различные  $m$ -частичные функции плотности  $n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$  и  $n'_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$ . В соответствии с принципом Ритца

$$\begin{aligned} E_{gs} &= \langle \psi | H | \psi \rangle < \langle \psi' | H | \psi' \rangle = \langle \psi' | H' + V + W - V' - W' | \psi' \rangle = \\ &= E'_{gs} + (C_N^{m-1})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i=1}^m \{V(\mathbf{r}_i) - V'(\mathbf{r}_i)\} + \\ &+ (C_{N-2}^{m-2})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i < j=2}^m \{W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - W'(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\}. \end{aligned}$$

Проводя аналогичные рассуждения, получим

$$\begin{aligned} E'_{gs} &< E_{gs} + (C_N^{m-1})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m n'_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i=1}^m \{V'(\mathbf{r}_i) - V(\mathbf{r}_i)\} + \\ &+ (C_{N-2}^{m-2})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m n'_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i < j=2}^m \{W'(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\}. \end{aligned}$$

Складывая оба неравенства в предположении, что  $n_m(r_1, \dots, r_m) = n_m(r_1, \dots, r_m)$ , приходим к противоречию:  $E_{gs} + E'_{gs} < E_{gs} + E_{gs}$ , доказывающему однозначность отображения  $D_m^{-1}$ , что позволяет сделать вывод о его обратимости и сформулировать первое положение обобщенной теоремы Хоэнберга—Кона: ожидаемое значение любой наблюдаемой величины, описываемой оператором  $F$ , для невырожденного основного состояния ферми-системы является однозначным функционалом точной  $m$ -частичной функции плотности основного состояния  $F[n_m] = \langle \psi[n_m] | F | \psi[n_m] \rangle$ . Отображение  $(CD_m)^{-1}$  является однозначным, иными словами,  $m$ -частичная функция плотности невырожденного основного состояния определяет гамильтониан  $H$  системы с точностью до аддитивной константы.

Второе положение обобщенной теоремы Хоэнберга—Кона является формулировкой вариационного принципа Рэлея—Ритца для функционала полной энергии: минимум функционала полной энергии невырожденного основного состояния ферми-системы с гамильтонианом  $H_0 \in \mathcal{H}_N$

$$E_0[n_m] = \langle \psi[n_m] | H_0 | \psi[n_m] \rangle$$

достигается на  $m$ -частичной функции плотности, соответствующей истинному распределению частиц в невырожденном основном состоянии системы (состояния  $|\psi[n_m]\rangle$  порождаются отображением  $D_m^{-1}$  из элементов множества  $\mathcal{N}_m$ ). Иными словами, точная  $m$ -частичная функция плотности невырожденного основного состояния  $n_{0m}(r_1, \dots, r_m)$  системы  $N$  фермионов, описываемой гамильтонианом  $H_0 \in \mathcal{H}_N$ , может быть определена путем минимизации функционала  $E_0[n_m]$ :

$$E_0[n_{0m}] = \min_{n_m \in \mathcal{N}_m} E_0[n_m].$$

3. Второе положение обобщенной теоремы Хоэнберга—Кона может быть распространено и на вырожденные основные состояния. В том случае, когда основное состояние ферми-системы является вырожденным, каждый гамильтониан  $H \in \mathcal{H}_N$  порождает множество  $\Psi_H = \{|\psi\rangle = \sum_{i=1}^q c_i |\psi_i\rangle\}$ , где  $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_q\rangle$  — ортонормированная система вырожденных состояний гамильтониана  $H$ ; для невырожденных основных состояний  $q=1$ . Объединение всех множеств  $\Psi_H$  будем далее обозначать  $\Psi$ .

Подобным образом  $m$ -частичные функции плотности основных состояний, соответствующие гамильтониану  $H \in \mathcal{H}_N$ , тоже образуют множество

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{H_m} &= \{n_m(r_1, \dots, r_m) | n_m(r_1, \dots, r_m) = \\ &= C_N^m \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \int dr_{m+1} \dots dr_N |\psi\rangle \langle \psi|, |\psi\rangle \in \Psi_H\}. \end{aligned}$$

Объединение всех  $\mathcal{N}_{H_m}$  образует множество  $\mathcal{N}_m$ .

Таким образом, с одним гамильтонианом  $H$  связано, вообще говоря, более чем одно основное состояние, и отображение  $C$ , связывающее гамильтонианы и волновые функции основного состояния, более не может считаться взаимно однозначным. В то же время, повторив рассуждения предыдущего пункта, можно показать, что ни один из элементов множества  $\Psi_H$  не совпадает ни с одним элементом множе-

ства  $\Psi_{H'}$ , если  $H$  и  $H'$ ,  $H \in \mathcal{H}_N$ ,  $H' \in \mathcal{H}_N$ , различаются более чем на постоянное слагаемое. Иными словами, отображение  $S^{-1}$  является однозначным.

В качестве второго шага рассмотрим отображение  $D_m$  множества функций  $\psi$  на множество  $\mathcal{N}^m$ . По аналогии с выводами предыдущего пункта можно показать, что две волновые функции основных состояний  $|\psi\rangle$  и  $|\psi'\rangle$ , соответствующие гамильтонианам  $H$  и  $H'$ , различающимся более чем на аддитивную константу,  $H \in \mathcal{H}_N$ ,  $H' \in \mathcal{H}_N$ , всегда приводят к различным  $m$ -частичным функциям плотности  $n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$  и  $n'_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$ , т. е. подмножества  $\mathcal{N}^m_{H_m}$  и  $\mathcal{N}^m_{H'_m}$ , соответствующие различным гамильтонианам  $H$  и  $H'$ , никогда не пересекаются. Таким образом, отображение  $(CD_m)^{-1}$  однозначно:  $m$ -частичная функция плотности, соответствующая любой из набора волновых функций основного состояния  $N$ -частичной ферми-системы, определяет гамильтониан  $H$  с точностью до постоянного слагаемого.

В то же время, в отличие от случая невырожденного основного состояния, возможна ситуация, когда система имеет вырожденное основное состояние, которому соответствуют две несколько различные волновые функции, приводящие к совпадающим  $m$ -частичным функциям плотности. В качестве примера достаточно рассмотреть атом лития, в котором «выключено» взаимодействие между электронами, и убедиться, что различные волновые функции двух основных состояний —  $(1s)^2(2p^-)$  и  $(1s)^2(2p^+)$  — приводят к совпадающим функциям плотности  $n_1(\mathbf{r}_1)$  и  $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Таким образом, при наличии вырождения заданная  $m$ -частичная функция плотности может относиться к различным волновым функциям основного состояния, следовательно, отображение  $D_m$  не является обратимым и не существует однозначного функционала  $|\psi[n_m]\rangle$ .

Этот факт влечет за собой важное следствие: ожидаемое значение любой наблюдаемой величины для вырожденного основного состояния ферми-системы при наличии вырождения уже нельзя рассматривать как заведомо однозначный функционал  $n_m[\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m]$ , что вносит некоторую сложность в использование вариационного принципа. Функционал полной энергии основного состояния системы с гамильтонианом вида (1), как легко показать, может быть представлен в виде

$$E[n_m] = T[n_m] + (C_{N-1}^{m-1})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m \cdot n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i=1}^m V(\mathbf{r}_i) + \\ + (C_{N-2}^{m-2})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m \cdot n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i < j=2}^m W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (6)$$

где  $T[n_m] = \langle \psi[n_m] | T | \psi[n_m] \rangle$  — функционал кинетической энергии основного состояния данной системы. Для использования вариационного принципа требуется, чтобы функционал  $T[n_m]$  был однозначным. Можно показать, что условие однозначности  $T[n_m]$  выполняется и для вырожденных основных состояний. Действительно, определив  $T[n_m]$  как

$$T[n_m] = \langle \psi[n_m] | T | \psi[n_m] \rangle = \langle \psi[n_m] | H - V - W | \psi[n_m] \rangle = \\ = \langle \psi[n_m] | H | \psi[n_m] \rangle - \langle \psi[n_m] | V + W | \psi[n_m] \rangle = \\ = E[n_m] - \left\{ (C_{N-1}^{m-1})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m \cdot n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i=1}^m V(\mathbf{r}_i) + \right. \\ \left. + (C_{N-2}^{m-2})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m \cdot n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \sum_{i < j=2}^m W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right\}, \quad (7)$$

где  $E[n_m] \equiv E_{gs}$ , мы видим, что функционал  $T[n_m]$  представляет собой сумму однозначных функционалов и, следовательно, также является однозначным. Таким образом, в выражении (7)  $|\psi[n_m]\rangle$  может быть любой из возможных волновых функций основного состояния, приводящих к данной функции  $n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$ . Функционал полной энергии (6), который теперь можно считать определенным для всех  $m$ -частичных функций плотности, относящихся к невырожденному или вырожденному основному состоянию, обладает следующим свойством: если система, описываемая гамильтонианом  $H_0$  вида (1), имеет энергию основного состояния  $E_0$ , то равенство  $E_0[n_{0m}] = E_0$  удовлетворяется для всех  $m$ -частичных функций плотности  $n_{0m}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$ , соответствующих основному состоянию гамильтониана  $H_0$ ; для всех остальных  $m$ -частичных функций плотности  $E_0[n_m] > E_0$ .

4. Использование функционала полной энергии в виде (6) позволяет избежать необходимости построения одночастичных обменно-корреляционных потенциалов, создающего ряд проблем в традиционном одночастичном методе функционалов плотности [1—3]. Предлагаемый подход позволяет избежать этих трудностей при описании ферми-систем с парными потенциалами взаимодействия между частицами с помощью  $m$ -частичных функций плотности при  $m > 1$ . Очевидно, что для систем с гамильтонианами вида (1) наиболее целесообразным будет выбор  $m=2$ .

Обобщенная теорема Хоэнберга—Кона легко может быть применена к случаю систем с более чем двухчастичными взаимодействиями, а также к ситуации, когда основной величиной, описывающей систему, является диагональный элемент зависящей от спина и (или) изотопического спина  $m$ -частичной матрицы плотности. Доказательство обобщенной теоремы Хоэнберга—Кона в этих случаях может быть проведено по предложенной схеме.

Единственной сложностью в данном подходе является получение явного выражения для функционала кинетической энергии  $T[n_m]$ . Заметив, однако, что

$$\begin{aligned} T[n_m] &= \langle \psi[n_m] | T | \psi[n_m] \rangle = \\ &= (C_N^{m-1})^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_m \sum_{i=1}^m \left( -\frac{1}{2} \Delta_i \right) \Gamma_m(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_m; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \Big|_{\substack{\mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}_1 \\ \dots \\ \mathbf{r}'_m = \mathbf{r}_m}} \\ &= C_N^m \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \int d\mathbf{r}_{m+1} \dots d\mathbf{r}_N \psi^*(\mathbf{r}'_1 \sigma_1, \dots, \mathbf{r}'_m \sigma_m, \mathbf{r}_{m+1} \sigma_{m+1}, \dots, \mathbf{r}_N \sigma_N) \times \\ &\quad \times \psi(\mathbf{r}_1 \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N \sigma_N), \end{aligned}$$

мы убеждаемся в том, что для определения  $T[n_m]$  мы можем воспользоваться любым выражением, полученным в рамках одночастичного метода [1—3], учитывая соотношение

$$n_1(\mathbf{r}_1) = N (C_N^m)^{-1} \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_m n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m).$$

Заметим, что функционал  $T[n_m]$  явно не зависит от вида потенциалов  $V$  и  $W$ , и, следовательно, мы можем считать функционал  $T[n_m]$  универсальным, применимым для систем с любыми потенциалами взаимодействия частиц с внешним полем и между собой.

Нами было получено также явное выражение для кинетической энергии системы как функционала двухчастичной функции плотности  $n_2(r_1, r_2)$  [4—6]:

$$T[n_2] = \frac{1}{N-1} \int dr_1 dr_2 \cdot \left\{ \frac{3}{5} (72\pi^4/p^2)^{1/3} [n_2(r_1, r_2)]^{4/3} + \left[ \frac{5}{576} \frac{[(\nabla_1 + \nabla_2) n_2(r_1, r_2)]^2}{n_2(r_1, r_2)} - \frac{1}{48} \frac{(\Delta_1 + \Delta_2) n_2(r_1, r_2)}{[n_2(r_1, r_2)]^{1/3}} \right] \right\},$$

где  $p$  — фактор вырождения, равный числу возможных значений проекций дискретных координат (для электронов  $p=2$ , для нуклонов  $p=4$  и т. д.).

Обобщенная теорема Хоэнберга—Кона, таким образом, может рассматриваться как основная теорема нового физического подхода к описанию ферми-систем, учитывающего корреляционные и обменные эффекты в исходной формулировке и в силу этого обладающего гораздо более широкой областью применения, чем одночастичные подходы.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Теория неоднородного электронного газа/Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. М., 1987. [2] Hohenberg P., Kohn W.//Phys. Rev. 1964. 136, N 3B. P. 864. [3] Dreizler R. M., Gross E. K. U. Density Functional Theory. Springer-Verlag, 1990. [4] Гаджиев А. М., Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1990. 31, № 4. С. 73. [5] Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М. и др.//Там же. 1991. 32, № 4. С. 42. [6] Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М.//Поверхность. 1993. № 2. С. 5.

Поступила в редакцию  
27.10.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 2

#### РАДИОФИЗИКА

УДК 621.318.136

#### О ПОРОГЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ СПИНОВЫХ ВОЛН В ОБРАЗЦАХ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

Е. В. Лебедева, Н. С. Седлецкая, И. Т. Трофименко  
(кафедра радиофизики)

Общее уравнение для параметрического процесса в ограниченных средах использовано при расчете порога возбуждения спиновых волн в образцах монокристаллов ферритов. Получено хорошее соответствие результатов расчетов и экспериментов. Учет конечных размеров образцов позволил объяснить особенности хода пороговых кривых для сфер малого диаметра (доли миллиметра). С помощью нелинейного LC-фильтра нижних частот радиодиапазона проведено моделирование параметрических процессов в средах с малыми и большими потерями.

При изучении параметрического возбуждения спиновых волн (СВ) в магнитных материалах обычно предполагается, что пороговые формулы, полученные для плоских СВ в безграничной среде [1, 2], применимы и для образцов конечных размеров. Однако такое предположение справедливо только при условии, что длина СВ много меньше размеров образца. Это требование часто не выполняется. Действительно, из расчета зависимостей пороговых полей  $h_{crit}$  от внешнего по-