

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 539.19+539.2

ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛА КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ В МЕТОДЕ МНОГЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ПЛОТНОСТИ

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

Рассматривается метод, являющийся обобщением метода функционалов плотности, основанный на представлении энергии системы как функционала диагонального элемента многочастичной матрицы плотности и позволяющий из первых принципов учесть обменно-корреляционные эффекты в системе. В настоящей работе получен вид функционала кинетической энергии в зависимости от двухчастичной функции плотности.

В работах [1—3] нами было показано, что метод функционала плотности, хорошо зарекомендовавший себя при описании многофермионных систем [4, 5], допускает обобщение, состоящее в следующем. Полная энергия основного состояния ферми-системы представляет собой однозначный функционал многочастичной функции плотности, минимум которого реализуется для функции, соответствующей истинному распределению частиц в системе. Большинство характеристик основного состояния системы являются функционалами многочастичной функции плотности. Предлагаемый подход, позволяющий избавиться от такой проблемы традиционного метода функционалов плотности, как построение обменно-корреляционного потенциала, и существенно упростить техническую сторону расчетов [2, 3], состоит в следующем.

Рассмотрим систему N фермионов с гамильтонианом

$$H = T + V + W,$$

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

с нормированной на единицу волновой функцией основного состояния $\psi(x_1, \dots, x_N)$. Здесь $(-1/2M\Delta_i)$ — оператор кинетической энергии i -й частицы, x_i — совокупность ее пространственной r_i , спиновой и изоспиновой координат, $V(r_i)$ и $W(r_i, r_j)$ — потенциалы взаимодействия i -й частицы с внешним полем и частиц i и j между собой, M — масса частицы. Можно показать, что полная энергия основного состояния этой системы определяется выражением

$$E = E[n_m] = T[n_m] + (C_{N-1}^{m-1})^{-1} \int dr_1 \dots dr_m \left(\sum_{i=1}^m V(r_i) \right) n_m(r_1, \dots, r_m) + (C_{N-2}^{m-2})^{-1} \int dr_1 \dots dr_m \left(\sum_{i < j=2}^m W(r_i, r_j) \right) n_m(r_1, \dots, r_m), \quad (2)$$

$$C_P^Q = P! / (Q! (P-Q)!),$$

$$n_m(r_1, \dots, r_m) = \text{sp}_{\sigma\tau} \Gamma(x_1, \dots, x_m; x'_1, \dots, x'_m), \quad (3)$$

$$\Gamma_m(x_1, \dots, x_m; x'_1, \dots, x'_m) = C_N^m \int dx_{m+1} \dots dx_N \Psi^*(x_1, \dots, x_N) \times \\ \times \Psi(x'_1, \dots, x'_m; x_{m+1}, \dots, x_N). \quad (4)$$

Интегрирование по dx_i предполагает интегрирование по непрерывным и суммирование по дискретным переменным. Кинетическая энергия основного состояния представляет собой однозначный функционал m -частичной функции плотности $n_m(r_1, \dots, r_m)$, допускающий представление

$$T[n_m] = (C_{N-1}^{m-1})^{-1} \int dx_1 \dots dx_m \left[\left(\sum_{i=1}^m \left(-\frac{1}{2M} \Delta_i \right) \right) \times \right. \\ \left. \times \Gamma_m(x'_1, \dots, x'_m; x_1, \dots, x_m) \right]_{x'_i=x_i}, \quad i=1, 2, \dots, m, \quad (5)$$

которое показывает, что величина $T[n_m]$ определяется пространственным распределением частиц в системе. Полезность предлагаемого метода определяется возможностью получения точного и достаточно простого явного выражения для $T[n_m]$. Для решения этой задачи удобно представить функционал кинетической энергии основного состояния в виде

$$T[n_m] = \int t[n_m] dr_1 \dots dr_m. \quad (6)$$

Структура $\{n_m\}$ может быть определена из соображений, аналогичных используемым в традиционном методе функционалов плотности [5, 6]. Поскольку в соответствии с (5) вид $T[n_m]$ не несет явной зависимости от потенциалов $V(r_i)$ и $W(r_i, r_j)$, мы имеем основание считать, что для системы с гамильтонианом вида (1) функционал $T[n_m]$ имеет тот же вид, что и для системы с гамильтонианом

$$H_0 = T + U, \quad U = \sum_{i=1}^N U(r_i), \quad (7)$$

для которой волновая функция основного состояния (с точностью до нормировочного множителя) может быть представлена в виде детерминанта, составленного из ортонормированных одночастичных волновых функций $\chi_\alpha(x_i)$. В этом случае m -частичная матрица плотности (4) может быть связана с одночастичной соотношением

$$\Gamma_m(x_1, \dots, x_m; x'_1, \dots, x'_m) = \frac{C_N^m}{N^m} \det \|\Gamma_1(x_i, x'_k)\|, \quad (8)$$

$$\Gamma_1(x, x') = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \chi_{\alpha}^*(x) \chi_{\alpha}(x'), \quad (9)$$

где n_{α} — собственные значения оператора чисел заполнения \hat{n}_{α} , который в рассматриваемом случае имеет вид [6]

$$\hat{n}_{\alpha} = \Theta(p_0^2(r) - \hat{p}^2). \quad (10)$$

Здесь $\Theta(z)$ — функция Хевисайда, $p_0(r)$ — локальный импульс Ферми, $\hat{p} = -i\nabla$ — оператор импульса.

Удобно ввести функцию распределения $f_m(r_1, \dots, r_m, p_1, \dots, p_m)$, связанную с матрицей плотности преобразованием Фурье:

$$\Gamma_m(x_1, \dots, x_m; x'_1, \dots, x'_m) =$$

$$= C_N^m \int dp_1 \dots dp_m f_m(r_1, \dots, r_m, p_1, \dots, p_m) \exp\left(\sum_{i=1}^m p_i(r_i - r'_i)\right). \quad (11)$$

Из (8) и (9) для системы с гамильтонианом (7) следует

$$f_m(r_1, \dots, r_m, p_1, \dots, p_m) = \frac{1}{m!} \det \|f_1(r_j, p_i) \exp(ip_i(r_j - r_i))\|, \quad (12)$$

$$f_1(r, p) = \exp(-ipr) \hat{n}_\alpha \exp(ipr). \quad (13)$$

Проинтегрированная по координатам функция распределения дает плотность вероятности для распределения по импульсам [6], в силу чего $\{n_m\}$ допускает представление

$$t\{n_m\} = \frac{N}{m} \text{sp}_{\sigma\tau} \int dp_1 \dots dp_m \left(\sum_{i=1}^m \frac{p_i^2}{2M}\right) f_m(r_1 \dots r_m, p_1 \dots p_m). \quad (14)$$

Наибольшую практическую ценность [1—3] представляет определение вида $\{n_2\}$. Опираясь на (8)—(14), легко показать, что

$$n_2(r_1, r_2) = \frac{1}{2} C_N^2 \text{sp}_{\sigma\tau} \{F(r_1, 0)F(r_2, 0) - F(r_1, r_{12})F(r_2, r_{21})\}, \quad (15)$$

$$t\{n_2\} = \frac{N}{2} \text{sp}_{\sigma\tau} \{K(r_1, 0)F(r_2, 0) + K(r_2, 0)F(r_1, 0) - \\ - K(r_1, r_{12})F(r_2, r_{21}) - K(r_2, r_{21})F(r_1, r_{12})\}, \quad (16)$$

$$F(r_i, r_{ij}) = \int dp f_1(r_i, p) \exp(ipr_{ij}), \quad r_{ij} = r_i - r_j,$$

$$K(r_i, r_{ij}) = \frac{1}{2M} \int dp p^2 f_1(r_i, p) \exp(ipr_{ij}) = -\frac{1}{2M} \Delta_j F(r_i, r_{ij}). \quad (17)$$

Точный вид функций $K(r_i, r_{ij})$ и $F(r_i, r_{ij})$ можно получить, исходя из (10) и (13). Функция Хевисайда в (10), аргумент которой представляет собой сумму некоммутирующих операторов, допускает разложение по коммутаторам $p_0^2(r)$ и \hat{p}^2 . В случае медленно меняющейся плотности ($|\nabla n_1(r)|/n_1(r) \ll p_0(r)$) можно ограничиться вторым порядком этого разложения [5, 6]:

$$\Theta(p_0^2 - \hat{p}^2) = \Theta(p_0^2 - p^2) + \frac{1}{2} (\Delta p_0^2 + 2ip \nabla p_0^2) \delta'(p_0^2 - p^2) + \\ + \frac{1}{3} [(\nabla p_0^2)^2 - 2(p \nabla) p_0^2] \delta''(p_0^2 - p^2) - \frac{1}{2} (p \nabla p_0^2)^2 \delta'''(p_0^2 - p^2),$$

$p_0 \equiv p_0(r)$, p — вектор (не оператор), с помощью (15) установить связь между $p_0(r)$ и $n_2(r_1, r_2)$ и получить явное выражение для $\{n_2\}$, учитывая, что вклад в интеграл (6) от двух последних слагаемых в (16) в соответствии с (17), первой теоремой Грина [7] и результатами, полученными для асимптотических свойств волновых функций многочастичных систем [8], равен нулю:

$$t\{n_2\} = \frac{1}{N-1} \left\{ \frac{3}{10} (18\pi^4)^{1/3} n_2^{4/3}(r_1, r_2) + \frac{5}{1152} [(\nabla_1 n_2(r_1, r_2))^2 + \right. \\ \left. + (\nabla_2 n_2(r_1, r_2))^2] n_2^{-1}(r_1, r_2) - \frac{1}{96} [(\Delta_1 + \Delta_2) n_2(r_1, r_2)] n_2^{-1/3}(r_1, r_2) \right\},$$

которое, как указывалось выше, может использоваться для описания ферми-систем с гамильтонианом вида (1), имеет достаточно простой вид и обеспечивает хорошую точность результатов [1—3].

Результаты расчетов ряда характеристик электронного газа вблизи поверхности раздела металл—вакуум, энергий адсорбции атомов и ионов водорода, а также расстояния, на котором адсорбированный протон находится на поверхности металла, полученные в рамках предлагаемого метода [1—3], существенно лучше согласуются с экспериментальными данными, чем результаты одночастичного метода. Это указывает на преимущество обобщенного подхода для описания свойств неоднородных ферми-систем с корреляциями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1991. 32, № 4. С. 42.
2. Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М. и др. // Поверхность. 1993. № 2. С. 5.
3. Гаджиев А. М., Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М. // Вестн. Моск. ун-та, Физ. Астрон. 1990. 31, № 4. С. 14.
4. Теория неоднородного электронного газа / Под ред. Ф. Лундквиста, Н. М. Марча. М., 1987.
5. Dreizler R. M., Gross E. K. U. Density Functional Theory. Springer-Verlag, 1990.
6. Киржниц Д. А. Полевые методы теории многих частиц. М., 1963.
7. Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике. М., 1986.
8. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4: Анализ операторов. М., 1982.

Поступила в редакцию
16.03.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 2

УДК 621.372.2

НОВАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ РАСЧЕТА МОД ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

А. Н. Боголюбов, А. Л. Делицын

(кафедра математики)

Предложена новая трехкомпонентная векторная постановка задачи расчета мод диэлектрических волноводов. В качестве собственного значения выступает непосредственно постоянная распространения. Предложенный метод существенно уменьшает требуемый объем машинной памяти и время счета.

Несмотря на то что применение метода конечных элементов к задаче расчета мод диэлектрических волноводов вызывает постоянный интерес, к настоящему времени отсутствуют достаточно эффективные алгоритмы, построенные на его основе [1]. Для волновода с произвольным кусочно-непрерывным профилем показателя преломления, сложной геометрией сечения и идеально проводящими стенками задача расчета мод формулируется следующим образом. Требуется найти решения вида $\mathbf{H} = \mathbf{H}(x, y)e^{i\beta z}$ уравнения

$$\operatorname{rot} \varepsilon^{-1} \operatorname{rot} \mathbf{H} - k^2 \mu \mathbf{H} = 0, \quad (x, y) \in D, \quad (1)$$

удовлетворяющие условиям

$$\varepsilon^{-1} \operatorname{rot} \mathbf{H} \times \mathbf{n} |_{\partial D} = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{H} \times \mathbf{n} |_{c+} = \mathbf{H} \times \mathbf{n} |_{c-}, \quad (3)$$