Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, Об одном новом вариационном принципе для фермионов, *Матем. заметки*, 1997, том 62, выпуск 4, 633–634

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm1648>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.89.197.203

26 апреля 2023 г., 03:18:23

ОБ ОДНОМ НОВОМ ВАРИАЦИОННОМ ПРИНЦИПЕ ДЛЯ ФЕРМИОНОВ

В. П. Маслов

Вариационный принцип Хартри–Фока описывает независимые (“холостые”) электроны; обобщающий его вариационный принцип Боголюбова описывает как “холостые” электроны, так и “куперовские пары” – “женатые” электроны. Ситуация, когда все электроны спарены (вблизи уровня Ферми), отвечает определенному состоянию (сверхтекучести): если заданы $2N$ частиц $x_1, x_2, \dots, x_{2N}, x_i \in \mathbb{R}^3$, то спаренными являются, например, $(x_1, x_2), (x_3, x_4), \dots, (x_{2N-1}, x_{2N})$. Антисимметрическая структура дает сумму всевозможных комбинаций “женатых” пар, например, $(x_1, x_3), (x_2, x_4), \dots$. Каждый член этой суммы будет содержать определенные пары (“моногамия”).

Оказывается, что, вообще говоря, возможна ситуация, когда все фермионы спарены между собой, образуя одновременно все комбинации пар, именно,

$$(x_1, x_2), (x_1, x_3), \dots, (x_1, x_N), (x_2, x_3), (x_2, x_4), \dots, (x_2, x_N), \dots, (x_{N-1}, x_N),$$

образуя “клубок”, в котором каждый “женат” сразу на всех остальных (“гарем”), и который труднее “разорвать”, чем разбить куперовскую пару. Возможно, такая структура отвечает ядерным силам.

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для N тождественных частиц:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_N \Psi &\equiv \left(\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x_i} + U(x_i) \right) + \varepsilon \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(x_i - x_j) \right) \Psi(x_1, \dots, x_N) \\ &= E \Psi(x_1, \dots, x_N), \quad x_i \in \mathbb{R}^3. \end{aligned}$$

Здесь $U(x)$ – внешний потенциал,

$$\varepsilon V(x_i - x_j) = V_0 v \left(\frac{|x_i - x_j|}{a} \right)$$

– потенциал взаимодействия между частицами, m – масса частицы.

Будем искать минимум функционала

$$I[\Psi] = \int dx_1 \dots dx_N \Psi^* (\widehat{\mathcal{H}}_N - E) \Psi$$

в классе функций

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \prod_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(x_i, x_j), \quad \Phi(x, y) = -\Phi(y, x).$$

Тогда получаем

$$\begin{aligned} &\int dx_3 \dots dx_N \left(\prod_{i=3}^N \Phi^*(x_1, x_i) \Phi^*(x_2, x_i) \right) \cdot \prod_{3 \leq j < k \leq N} \Phi^*(x_j, x_k) \\ &\times \left(\sum_{l=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x_l} + U(x_l) \right) + \varepsilon \sum_{1 \leq l < n \leq N} V(x_l - x_n) - E \right) \cdot \prod_{1 \leq p < q \leq N} \Phi(x_p, x_q) = 0. \end{aligned}$$

Вариационный принцип Хартри–Фока дает точный ответ в случае, когда потенциал взаимодействия равен 0; вариационный принцип Боголюбова дает точный ответ для модели БКШ. Приведенный вариационный метод совпадает с главным членом квазиклассической асимптотики для основного состояния гладкого положительного потенциала взаимодействия (притяжения):

$$V(x) > 0 \text{ при } x \neq 0, \quad V(0) = 0, \quad U(x) \equiv 0.$$

Действительно, в последнем случае асимптотика дается каноническим оператором, отвечающим росту в точке покоя $p = 0$, $x = 0$ задачи

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi_1 + V(x) \Phi_1 = \lambda_1 \Phi_1,$$

где λ_1 – первое возбужденное состояние (с единичным оператором рождения),

$$\Phi_1 = \Phi_1^0(x, \hbar) + O(\hbar^2), \quad \Psi_0(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{N!} \left(\prod_{i < j} \Phi_1^0(x_i - x_j, \hbar) + O(\hbar^2) \right).$$

Энергия основного состояния равна

$$E_0 = V_0 \cdot \frac{\hbar}{a\sqrt{mV_0}} \cdot \sqrt{N \frac{d^2 v}{dr^2}(0)} \cdot \frac{N^2 - 1}{2} + V_0 \cdot O\left(\frac{\hbar^2}{ma^2 V_0}\right),$$

энергия первого возбужденного состояния равна

$$E_1 = E_0 + 2V_0 \cdot \frac{\hbar}{a\sqrt{mV_0}} \cdot \sqrt{N \frac{d^2 v}{dr^2}(0)} + V_0 \cdot O\left(\frac{\hbar^2}{ma^2 V_0}\right).$$

Таким образом, при $N \rightarrow \infty$ энергия, требуемая для возбуждения, пропорциональна $\sqrt{N}$. Если $v(|x - y|)$ стремится к 0 при $|x - y| \rightarrow 0$ достаточно быстро, то матричный элемент перехода (для произвольного $\hbar$ -псевдодифференциального оператора с гладким убывающим символом) между основным состоянием и всеми “холостыми” фермионами экспоненциально мал при $\hbar \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$.

Если уравнения Хартри–Фока и Боголюбова–БКШ определяют асимптотику при $N \rightarrow \infty$, то предложенный вариационный метод отвечает задачам, в которых $\hbar \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ при некоторых соотношениях между $\hbar$ и N .

Автор приносит благодарность аспирантам Г. Ковалю и А. Рууге за помощь в вычислениях.