

УДК 539.186

А.В.Глушков, д.ф.-м.н., Ю.А.Кругляк, д.х.н.
Одесский государственный экологический университет

КВАЗИЧАСТИЧНЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ФУНКЦИОНАЛ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ И ДИНАМИКА ЭФФЕКТИВНОГО БОЗЕ-КОНДЕНСАТА: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ

Рассмотрены теория квазичастичного энергетического функционала при ненулевой температуре τ и её некоторые приложения. Термодинамический потенциал многоэлектронной системы во внешнем стационарном поле для данной τ определяется динамикой эффективного многочастичного бозе-конденсата в атомах физического пространства электронов. Структура искомого пространства определяется ячеистой системой поверхностей нулевого потока импульса энтропии при наличии нулевого тока плотности бозе-конденсата.

Ключевые слова: *эффективный бозе-конденсат, атомы физического пространства электронов*

Введение. К числу фундаментальных задач современной математики и теоретической физики относится построение корректных энергетических функционалов для описания многочастичных систем. Развитию формализма энергетического функционала плотности (ФП) посвящено в последнее время достаточно большое число работ [1–5]. Общеизвестно, что его применение базируется на известных теоремах Хохенберга – Кона ($\tau = 0$, где τ – температура) и Мермина ($\tau \neq 0$), согласно которым энергия и термодинамический потенциал многочастичной системы являются универсальными ФП. Хотя эти теоремы устанавливают существование такого ФП, их практическая реализация сталкивается с рядом существенных трудностей [3,5]. К числу важнейших результатов теории следует отнести конструктивный подход к получению оптимальных представлений для точного ФП, квазичастичный формализм ФП Безносюка – Крячко, развивающий квазичастичную концепцию Кона – Шэма и метод Леви – Валлоне [3,5]. Отметим также квазичастичный ферми-жидкостный формализм [4,6-9], учитывающий многочастичные корреляции в системе. Фундаментальность универсального ФП Вайзеккера, описывающего энергию эффективного конденсата невзаимодействующих бозонов, показана в [3]. Отметим, что в большинстве работ развивается теория ФП при температуре $\tau = 0$, в то время как аналогичная теория при $\tau \neq 0$ имеет ряд проблем.

Теория. Фундаментальными результатами теории энергетического ФП при ненулевой температуре являются следующие два [1-3]. В большом каноническом ансамбле при данной температуре распределение плотности $n(\vec{r})$ однозначно определяет величину $V(\vec{r}) - \mu$ (μ – химический потенциал). При данных $V(\vec{r})$ и μ существует функционал от $n(\vec{r})$

$$\Omega_{V-\mu}[n'(\vec{r})] = \int (V(\vec{r}) - \mu)n'(\vec{r})d^3r + F(n'(\vec{r})), \quad (1)$$

достигающий абсолютного минимума, когда $n(\vec{r})$ – правильная плотность $n(\vec{r}) \sim V(\vec{r})$. Значение $\Omega_{V-\mu}$ в \min равно термодинамическому потенциалу; F – универсальный, зависящий от τ , ФП, представляющий собой внутреннюю энергию системы. Распределение $n(\vec{r})$ находится как решение функционального уравнения (при соответствующих граничных условиях) вида

$$\frac{\delta F[n^N(\vec{r})]}{\delta n^N(\vec{r})} + V(\vec{r}) = \mu. \quad (2)$$

Универсальный функционал электронов (фермионов) при данной τ записывается следующим образом [10]:

$$F_\Phi[n'(\vec{r})] = \text{Sp} \rho' \left(\hat{T} + \hat{U} - \frac{1}{\beta} \ln \rho' \right) = U[n'(\vec{r})] + \Delta S[n'(\vec{r})] + G[n'(\vec{r})], \quad (3)$$

$$G[n'(\vec{r})] = T[n'(\vec{r})] + \tau S[n'(\vec{r})],$$

где ρ' – большой канонический оператор матрицы плотности, \hat{T}, \hat{U} – операторы кинетической энергии и энергии кулоновского взаимодействия, $\hat{U} = \frac{e^2}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$, $\beta = (k_B \tau)^{-1}$, G – свободная энергия Гельмгольца невзаимодействующих электронов, S – энтропия, ΔS – эффективная энергия корреляции, N – представимая плотность $n_\Phi^N(\vec{r})$, которая порождается множеством фермионных волновых функций $\{n_\Phi^N \leftarrow \Psi_\Phi^N\}$; $\Psi_\Phi^N[n_\Phi^N]$ реализует минимальное математическое ожидание внутренней энергии электронов при фиксированной $n_\Phi^N(\vec{r})$. Обобщая вышеотмеченные результаты, в [7,10] определены универсальные энергетические ФП эффективных взаимодействующих и невзаимодействующих бозонов, каждый из которых имеет массу и заряд электронов (во 2 случае – только массу):

$$F_\sigma[n_\sigma^N] = G[n_\sigma^N] + U[n_\sigma^N] + \Delta S[n_\sigma^N], \quad (4)$$

$$F_{\sigma 0}[n_\sigma^N] = G[n_\sigma^N], \quad (5)$$

где N – представимая плотность бозонов n_σ^N , порождаемая множеством N - бозонных волновых функций $\Psi_\sigma^N \rightarrow n_\sigma^N$; $\Psi_{\sigma 0}^N[n_\sigma^N]$ и $\Psi_{\sigma 0n}^N[n_\sigma^N]$ – волновые функции соответственно взаимодействующих и невзаимодействующих бозонов, которые реализуют минимальное математическое ожидание внутренней энергии бозонов при фиксированной $n_\sigma^N(\vec{r})$. Условия N - представимости матрицы плотности первого порядка фермионов и бозонов сводятся к условиям разложения:

$$n_\Phi^N(\vec{r}) = N \sum_\alpha \frac{\eta_\alpha^\Phi |\Psi_\alpha^1(\vec{r})|^2}{1 + e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}}, 0 \leq \frac{\eta_\alpha^\Phi}{1 + e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}} \leq \frac{1}{N}; \quad (6)$$

$$n_{\sigma^\dagger}^N(\vec{r}) = N \sum_\alpha \frac{\eta_\alpha^{\sigma^\dagger} |\Psi_\alpha^1(\vec{r})|^2}{1 + e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}}, 0 \leq \frac{\eta_\alpha^{\sigma^\dagger}}{1 + e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}} \leq 1. \quad (7)$$

В приближении идеального газа множество фермионных плотностей содержится в множестве бозонных плотностей: $\{n_\Phi^N(\vec{r})\} \subset \{n_\sigma^N(\vec{r})\}$. Далее рассматривается класс N -представимых фермионных плотностей системы N – электронов [4-6]. Термодинамический потенциал записывается в виде

$$\Omega_{i(V-\mu)}^{N\Phi} = G_{\sigma^\dagger}^N[n_i^N] + \int_{\omega} \bar{V}([n_i^N], \vec{r}) n_i^N(\vec{r}) d\omega. \quad (8)$$

Потенциал внешнего эффективного поля системы взаимодействующих бозонов определяется вспомогательными универсальными ФП:

$$\bar{V}([n^N], \bar{r}) = \bar{V}(\bar{r}) - \mu + V_H([n^N], \bar{r}); \quad (9)$$

$$\int_{\omega} V_H([n^N], \bar{r}) n^N(\bar{r}) d\omega = H_{\neq} [n^N] + H_{\neq\Phi} [n^N], \quad (10)$$

где $H_{\neq} [n^N]$ – энергия корреляции N взаимодействующих бозонов, $H_{\neq} [n^N] = F_{\neq} [n^N] - G_{\neq} [n^N]$, $H_{\neq\Phi} [n^N]$ – поправка к энергии корреляции бозонов, учитывающая принцип Паули: $H_{\neq\Phi} [n^N] = F_{\Phi} [n^N] - F_{\neq} [n^N]$. Волновая функция неоднородного бозе-конденсата:

$$\Psi_{\neq 0H}([n^N], \bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) = \exp\left\{\sum_{i=1}^N \frac{i}{\hbar} S_{\neq\hbar}^D([n^N], \bar{r}_i)\right\};$$

$$S_{\neq\hbar}^D([n^N], \bar{r}_i) = \frac{i\hbar}{2} S\left(\frac{n^N(\bar{r}_i)}{N}\right).$$

Здесь $S_{\neq\hbar}^D$ – обобщенная функция действия, пропорциональная удельной энтропии i - го бозона, где по определению $S(n) = -\ln n$. Исходя из $S_{\neq\hbar}^D$, определяется функционал импульса энтропии i - го бозона

$$\bar{P}_{\neq}([n^N], \bar{r}_i) = \text{Im}\left\{\bar{\nabla}_r S_{\neq\hbar}^D([n^N], \bar{r}_i)\right\},$$

непосредственно связанный с принципом неопределенности Гейзенберга. Математическое ожидание оператора кинетической энергии на волновых функциях $\Psi_{\neq 0}^N [n^N]$ определяется следующим образом

$$T_{\neq} [n^N] = \sum_{j=1}^M \int \bar{P}_{\neq}^2([n^N], \bar{r}) n^N(\bar{r}) / 2m d\omega_j = \sum_{j=1}^M \int (\hbar / 8m) [\bar{\nabla}_r n^N(\bar{r})]^2 / n^N(\bar{r}) d\omega_j \quad (11)$$

при условии, что на границах $\{J\}M$ атомов (для объемов ω_j выполняется соотношение $\sum_{j=1}^M \omega_j = \omega$) выполняется условие нулевого потока импульса энтропии $\bar{P}_{\neq}([n^N], \bar{r})$

$$\bar{P}_{\neq}([n^N], \bar{r}) \cdot \vec{l}_j \Big|_{\bar{r} \in J_j} = 0, j = 1, \dots, M. \quad (12)$$

Математическое ожидание тока плотности бозе-конденсата

$$\vec{j}^N([n^N], \bar{r}) = n^N(\bar{r}) \sum_{i=1}^N \text{Re}\left\{\bar{\nabla}_r S_{\neq\hbar}^D([n^N], \bar{r}_i)\right\} = 0.$$

Условия (12), т.е. условия нулевого потока импульса энтропии распределения плотности бозе-конденсата, фактически задают поверхности, ячеистая система которых при наличии нулевого тока плотности определяет атомную структуру физического пространства электронов. С учетом (2), (8)–(12) состояния системы электронов во внешнем скалярном поле $V(\bar{r})$ при данной τ определяются итерационным решением системы функциональных уравнений для каждого $\bar{r} \in \omega_j$ [7]:

$$\frac{\hbar^2}{4m} \bar{\nabla}_r n^N(\bar{r}) + \frac{\hbar^2}{8m} \left[\frac{\bar{\nabla}_r n^N(\bar{r})}{n^N(\bar{r})} \right]^2 - \tau \frac{\delta S[n^N]}{\delta n^N(\bar{r})} + \tilde{V}(\bar{r}) = \mu; \quad (13)$$

$$\tilde{V}(\bar{r}) = V(\bar{r}) + V_H([n^N], \bar{r}) + \frac{\delta V_H([n^N], \bar{r})}{\delta n^N(\bar{r})} n^N(\bar{r}); \quad (14)$$

$$\bar{\nabla}_r n^N(\bar{r}) \cdot \vec{l}_j \Big|_{\bar{r} \in J_j} = 0. \quad (15)$$

Функционал $T_{\neq} [n^N]$ является известной поправкой Вайзеккера и фундаментальной частью универсального ФП частиц любой квантовой статистики [3,10]. Вопрос о соотношении системы (13)–(15) при $\tau \rightarrow 0$ с другими подходами, в частности, теориями

[1-4] рассмотрен в [7-12]. Ключевой результат: термодинамический потенциал электронных систем во внешнем локальном скалярном стационарном поле $V(\vec{r})$ для данной температуры τ определяется динамикой эффективного N - частичного бозе-конденсата в подпространствах – атомах физического пространства электронной системы. При этом [10] атомная структура физического пространства электронов определяется ячеистой системой поверхностей нулевого потока импульса энтропии (условие (12)) при наличии нулевого тока плотности бозе-конденсата.

Приложения и комментарии. Следует подчеркнуть, что, по-видимому, некоторые указанные результаты можно получить в рамках лагранжевой теории ФП [4-6], основанной на методе функций Грина (ФГ), в частности, используя уравнения для мацубаровских ФГ. Естественным применением теории может быть описание так называемых "лоджей" Бадера [3,13]. Действительно, условия (15) эквивалентны условиям Бадера топологического разбиения физического пространства электронов на атомы. Еще одно очевидное перспективное применение искомой теории в квантовой геометрии и адродинамике [2,14]. Наконец, указанному топологическому разбиению физического пространства электронов на атомы можно в известном смысле поставить в соответствие открытый недавно [15] эффект ячейковой структуризации в гипотетической π -электронной нано-органической сверхпроводящей аналоговой системе, имитирующей «human brain» (см. рис.1), обнаруженный на основе компьютерной симуляции с использованием эффективных поляризационных потенциалов взаимодействия в π -электронной системе органических супермолекул [16-18].

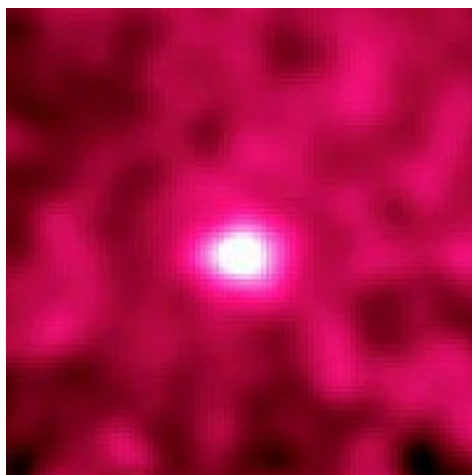


Рис.1 - Ячеистая структура в гипотетической π -электронной нано- органической сверхпроводящей аналоговой системе, имитирующей «human brain» [15].

Авторы выражают глубокую признательность профессорам W.Kohn, L.Sham, C. Roothaan и E. Gross за полезные дискуссии.

Список литературы

1. Kohn W., Sham L.J. Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas//Phys. Rev. A.-1964.- Vol.140.-P.1133–1142.
2. Schmid N., Engel E., Dreizler R.M. Density functional approach to quantum hydrodynamics// Phys.Rev.C.- 1995.-Vol.52.-P.164-169.
3. Gross E.G.,Kohn W. Exchange-correlation functionals in density functional theory.-N-Y: Plenum, 2005.- 380P.
4. Глушков А.В., Кругляк Ю.А. Квазичастичный лагранжев метод в теории атомов и ионов// В кн.: Актуальные проблемы спектроскопии.-М.: Изд-во АН СССР, 1985.-С. 291-394.

5. Глушков А.В. Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.- Одесса, Астропринт.-2008.- 700С.
6. Глушков А.В. Универсальный квазичастичный энергетический функционал в теории функционала плотности для релятивистского атома// Опт. Спектр.-1989.-Т.66,№1-С.31-36.
7. Глушков А.В. Приближенный квазичастичный функционал в теории функционала плотности// Укр.Физ.журн. -1989.-Т34.-С.1422-1425.
8. Глушков А.В. Эффективный оптимизированный энергетический функционал в теории молекул// Журн. Структ. химии.-1990.-Т.31,№1.-С.11-16.
9. Глушков А.В. Эффективный учет энергетических эффектов обмена и корреляции в теории многоэлектронных систем//Журн. Структ.Химии.- 1990.-Т.31,№4.-С.3-7.
10. Глушков А.В. Квазичастичный подход в теории функционала плотности при конечных температурах и динамика эффективного бозе-конденсата// Укр.Физ.журн.- 1993.-Т.38.-С.152-157.
11. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Prepelitsa G.P., Ignatenko A.V. Manifestation of the new laser-electron nuclear spectral effects in thermalized plasma: QED theory of cooperative laser-electron- nuclear processes// J.Phys.CS.-2005.-Vol.11.-P.199-206.
12. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A. QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer).-2008.-Vol.18.-P.541-558.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Shanina T.P. New quantum chemical approach to modelling catalytic processes//Proc. of XIth International Congress of Quantum Chemistry.-Bonn (Germany).-2003.-P.D21.
14. Glushkov A.V., Lovett L., Loboda N.S. Quantization of quasistationary states for multi-particle Dirac-Kohn-Sham equation in collision problem: New approach//Proc. of International conference on Geometry-08.-Odessa (Ukraine).-2008.-P.168.
15. Glushkov A.V., Lovett L. Is it real to create artificial superconductive nano-organic analog of the human brain// Preprint UK National Acad.of Sciences N B-3, London, 2007.
16. Глушков А.В. Истинный эффективный валентный гамильтониан молекул в последовательной полужемпирической теории //Журн. Структ. химии.- 1988.- Т.29, №4.-С.3-10.
17. Глушков А.В. Последовательный подход к построению модельного гамильтониана валентных электронов // Журн.Структ.Химии.-1993.-Т.34, №5.-С.3-11.
18. Глушков А.В. Новая форма эффективного потенциала для учета поляризационных эффектов в расчетах π -электронных состояний органических молекул// Журн. Структ.Химии.-1993.-Т.34, №5.-С.12-19.

Квазічастинковий енергетичний функціонал при скінчених температурах і динаміка ефективного бозе-конденсату: Теорія і додатки.

Глушков О.В., Кругляк Ю.О.

Розглянуто теорію квазі-частинкового енергетичного функціоналу при ненульовій температурі τ і деякі її додатки. Термодинамічний потенціал багатоелектронної системи у зовнішньому стаціонарному полі для даної τ визначається динамікою ефективного багаточастинкового бозе-конденсату в атомах фізичного простору електронів. Структура такого простору визначається комірковою системою поверхонь нульового потоку імпульсу ентропії при наявності нульового току густини бозе-конденсату.

Ключові слова: ефективний бозе-конденсат, атоми фізичного простору електронів

Quasiparticle energy functional for finite temperatures and effective bose-condensate dynamics: Theory and applications.

Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A.

It is considered a theory of the quasiparticle energy functional under non-zero temperatures τ and some its applications. A thermodynamical potential for multielectron system in external stationary field for given τ is defined by dynamics of effective Bose-condensate in atoms of physical space of electrons. Structure of this space is defined by the cell system of surfaces of zeroth flux for entropy pulse under availability of the zeroth current of the bose-condensate density.

Keywords: effective Bose-condensate, atoms of physical space of electrons