# ВЕСТНИК ЛЕНИНГРАДСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 10

СЕРИЯ

ФИЗИКИ И ХИМИИ

Выпуск 1

ЛЕНИНГРАД
1965

Ю. Н. Демков, И. В. Комаров

# МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ СИСТЕМЫ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ФЕРМИОНОВ

## § 1. Введение

Рассмотрим обычное определение матрицы плотности (см., например, [1]). Пусть имеется замкнутая система, описываемая функцией $\Psi(q, x)$, разбитая на подсистемы, причем $x$ — совокупность координат интересующей нас подсистемы, а $q$ — остальные координаты системы. Пусть $f$ — некоторая физическая величина, относящаяся к подсистеме. Тогда среднее значение $\overline{f}$ этой величины в рассматриваемом состоянии есть

$$\overline{f}=\iint \Psi^*(q, x)\hat{f}\,\Psi(q, x)\,dq\,dx. \tag{1,1}$$

Введем функцию $\rho(x, x')$

$$\rho(x, x')=\int \Psi^*(q, x')\Psi(q, x)\,dq. \tag{1,2}$$

Ее называют матрицей плотности. С помощью матрицы плотности среднее значение $\overline{f}$ можно писать в виде

$$\overline{f}=\int \left[\hat{f}\rho(x, x')\right]_{x'=x} dx. \tag{1,3}$$

В том случае, когда подсистема совпадает со всей системой, матрица плотности есть $\rho=\Psi^*(x')\Psi(x)$. Для замкнутой системы невзаимодействующих фермионов матрица плотности приобретает простой вид

$$\rho_N(x, x')=\sum_{n=1}^{N}\psi_n^*(x')\psi_n(x), \tag{1,4}$$

где $\psi_1(x), \ldots, \psi_N(x), \ldots$ — одноэлектронные волновые функции. Формула (1,4) не учитывает спин.

Диагональные элементы матрицы плотности имеют простой физический смысл — они дают плотность электронного газа в данной точке. Для идеального ферми—газа обычно вводят представление о фазовом пространстве и максимальном импульсе, через который легко выразить электронную плотность

$$n(r)=\frac{p_0^3}{3\pi^2} \tag{1,5}$$

(в безразмерных единицах).

Приближение (1,5) называют фермиевским. В этом приближении можно построить модель Томаса—Ферми для атома, выражая через $n(r)$ кинетическую и потенциальную энергию и используя уравнение Пуассона. (Можно использовать уравнения Хартри—Фока, как это делал Дирак [2].)

Однако полученная плотность ведет себя неудовлетворительно как на больших, так и на малых расстояниях от ядра, что особенно резко заметно на больших расстояниях, где томас-фермиевская плотность падает по степенному закону, вместо экспоненциального. Физически это связано с тем, что согласно (1,5) частица считается свободной в единице объема (последнее неправомерно в классически недостижимой области, начиная с точки поворота).

В связи с этим представляет определенный интерес точное вычисление матрицы плотности в различных полях, что и является целью настоящей работы.

## § 2. Одномерные задачи

1. Будем рассматривать свободную частицу как предельный случай частицы в прямоугольной яме при глубине и ширине, стремящихся к бесконечности. Для того чтобы проследить связь с последующими задачами, выделим уровни с четной и нечетной волновыми функциями. Уравнение Шредингера для такой задачи

$$\psi'' + 2(E-u)\psi = 0,$$
$$u = \begin{cases} 0 & |x| < a, \\ \infty & |x| > a, \\ a \to \infty. & \end{cases} \tag{2,1}$$

Решениями, нормированными на $\delta$-функцию от энергии, будут

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2\pi k}} \cos kx & \text{— четные уровни,} \\ \dfrac{1}{\sqrt{2\pi k}} \sin kx & \text{— нечетные уровни,} \end{cases} \tag{2,2}$$

где $k = \sqrt{2E}$.

Вычислим матрицу плотности, заменяя сумму по уровням интегралом. Тогда

$$\rho_E^{\text{неч}}(x, x') = \int\limits_0^k \frac{\sin kx \sin kx'}{2\pi k} k dk =$$
$$= \frac{1}{2\cdot 2\pi}\left\{\frac{1}{x-x'}\sin k(x-x') - \frac{1}{x+x'}\sin k(x+x')\right\} =$$
$$= \frac{1}{2}\left\{\frac{1}{x-x'}\left(\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\partial}{\partial x}\right) - \frac{1}{x+x'}\left(\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial x}\right)\right\}\frac{\sin kx \sin kx'}{2\pi k}.$$

Вводя обозначения

$$\frac{1}{x-x'}\left(\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\partial}{\partial x}\right) \equiv L, \quad \frac{1}{x+x'}\left(\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial x}\right) \equiv L_+, \tag{2,3}$$

можно записать

$$\rho_E^{\text{неч}}(x, x') = \frac{+1}{2}(L - L_+)\,\psi_E^{\text{неч}}(x)\,\psi_E^{\text{неч}}(x'). \tag{2,4а}$$

Аналогично вычисляется $\rho_E^{\text{чет}}(x, x')$

$$\rho_E^{\text{чет}}(x, x') = \frac{-1}{2}(L + L_+)\,\psi_E^{\text{чет}}(x)\,\psi_E^{\text{чет}}(x'). \tag{2,4б}$$

Чтобы получить полную плотность, надо сложить $\rho_E^{\text{неч}}(x, x')$ и $\rho_E^{\text{чет}}(x, x')$. Нечетная функция по сравнению с четной функцией той же энергии имеет на один узел „больше“. Выражая через нее матрицу плотности, получаем окончательно

$$\rho_E(x, x') = L\psi_E^{\text{неч}}(x)\,\psi_E^{\text{неч}}(x') = \frac{1}{2\pi}\frac{\sin k(x-x')}{x-x'}. \tag{2,5}$$

**2.** Вычислим матрицу плотности однородного поля. В этом случае потенциал имеет вид $V = -Fx$, а соответствующее уравнение Шредингера

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + 2(E + Fx)\psi = 0. \tag{2,6}$$

После замены переменных $\xi = \left(x + \frac{E}{F}\right)\sqrt[3]{2F}$ (см. [1]) это уравнение переходит в

$$\psi'' + \xi\psi = 0, \tag{2,7}$$

т. е. не содержит параметра энергии. Отсюда видно, что решение (2,6), (функция двух переменных $\psi(x, E)$) фактически зависит лишь от одной переменной $\psi(\xi) = \psi\left[\left(x + \frac{E}{F}\right)\sqrt[3]{2F}\right]$. Поэтому

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{1}{F}\frac{\partial\psi}{\partial E}. \tag{2,8}$$

Имея в виду свойство (2,8), легко вычислить матрицу плотности однородного поля. Для этого рассмотрим уравнения в системе единиц $F = 1$

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x_1^2} + 2(E + x_1)\psi_1 = 0,$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x_2^2} + 2(E + x_2)\psi_2 = 0.$$

Домножим первое уравненне на $\psi_2$, а второе на $\psi_1$ и вычтем из первого второе, тогда

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x_1^2}\psi_2 - \psi_1\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x_2} + 2(x_1 - x_2)\psi\,\psi_2 = 0.$$

С учетом свойства (2,8) это равносильно

$$\frac{d}{dE}\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\psi_1\psi_2 - \frac{\partial}{\partial x_2}\psi_1\psi_2\right) = 2(x_2 - x_1)\psi_1\psi_2.$$

Интегрируя по энергии от $-\infty$, где $\psi = 0$, до $E$ — максимальной энергии, получим искомое выражение для матрицы плотности однородного поля

$$\rho_E(x_1, x_2) = \frac{1}{2}\frac{1}{x_1 - x_2}\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1}\right)\psi_E(x_1)\psi_E(x_2). \tag{2,9}$$

Или в обозначениях (2,3)

$$\rho_E(x_1, x_2) = \frac{1}{2}L\psi_E(x_1)\psi_E(x_2). \tag{2,10}$$

В обычных единицах это выражение имеет вид

$$\rho_E(x_1, x_2) = \left(\frac{h^2}{2mF^2}\right)^{1/3}L\psi_E(x_1)\psi_E(x_2). \tag{2,10a}$$

**3.** Рассмотрим гармонический осциллятор. Запишем уравнение Шредингера в безразмерных переменных $h = \omega = m = 1$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_n + [(2n + 1) - x^2]\psi_n = 0. \tag{2,11}$$

Вычислим сумму $\rho_N = \sum_{n=0}^{N}\psi_n(x_1)\psi_n(x_2)$, используя рекуррентную формулу

$$x\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}. \tag{2,12}$$

Имеем:

$$(x_1 - x_2)\,\rho_N(x_1,\ x_2) = \sum_{n=0}^{N}(x_1\psi_n(x_1)\,\psi_n(x_2) - \psi_n(x_1)\,x_2\psi_n(x_2)) =$$

$$= \sum_{n=0}^{N}\Big\{\psi_n(x_2)\Big[\sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1}(x_1) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}(x_1)\Big] -$$

$$- \psi_n(x_1)\Big[\sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1}(x_2) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}(x_2)\Big]\Big\} =$$

$$= \sqrt{\frac{N+1}{2}}\,\big[\psi_N(x_2)\,\psi_{N+1}(x_1) - \psi_N(x_1)\,\psi_{N+1}(x_2)\big],$$

откуда

$$\rho_N(x_1,\ x_2) = \sqrt{\frac{N+1}{2}}\,\frac{\psi_N(x_2)\,\psi_{N+1}(x_1) - \psi_N(x_1)\,\psi_{N+1}(x_2)}{x_1 - x_2}. \tag{2,13}$$

Применяя рекуррентную формулу

$$\sqrt{2(n+1)}\,\psi_{n+1} = \left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi_n, \tag{2,14}$$

получим окончательное выражение

$$\rho_N(x_1,\ x_2) = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{x_1 - x_2}\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1}\right) + 1\right]\psi_N(x_1)\,\psi_N(x_2) =$$

$$= \frac{1}{2}(L + 1)\,\psi_N(x_1)\,\psi_N(x_2). \tag{2,15}$$

Соотношения типа (2,13) хорошо известны в теории ортогональных полиномов [3]. Если имеется система полиномов, ортогональных на отрезке $(a,\ b)$ с весом $w(x)$, т. е.

$$\int_a^b p_m(x)\,p_n(x)\,w(x)\,dx = \delta_{mn},$$

то для суммы

$$K_N(x_1,\ x_2) = \sum_{n=0}^{N} p_n(x_1)\,p_n(x_2)$$

справедлива формула Кристоффеля — Дарбу

$$K_N(x_1,\ x_2) = \frac{k_N}{k_{N+1}}\,\frac{p_{N+1}(x_1)\,p_N(x_2) - p_N(x_1)\,p_{N+1}(x_2)}{x_1 - x_2},$$

где $k_N$ — коэффициент при старшей степени полинома $p_N(x)$.

Для гармонического осциллятора можно также вычислить отдельно вклад в матрицу плотности четных и нечетных состояний. Вывод при этом полностью аналогичен предыдущему, но надо использовать соответствующие рекуррентные соотношения

$$\left[x^2 - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]\psi_n(x) = \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2}\,\psi_{n-2} + \frac{\sqrt{n(n+1)}}{2}\,\psi_{n+2}$$

и

$$\sqrt{n(n+1)}\,\psi_{n+1} = (x^2 + n)\,\psi_{n-1} - x\psi'_{n-1}.$$

Тогда

$$\rho_N^{\text{чет, неч}}(x_1,\ x_2) = \sum_{n=0}^{\left[\frac{N}{2}\right]}\psi_{N-2k}(x_1)\,\psi_{N-2k}(x_2) =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{x_1^2 - x_2^2}\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_1} - x_2\frac{\partial}{\partial x_2}\right) + 1\right]\psi_N(x_1)\,\psi_N(x_2), \tag{2,16}$$

причем четность $\rho_N^{\text{чет, неч}}(x_1, x_2)$ соответствует четности $N$. Замечая, что

$$M \equiv \frac{1}{x_1^2 - x_2^2}\left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}\right) = \frac{1}{2}[L - L_+],$$

получим

$$\rho_N^{\text{чет, неч}}(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(M+1)\,\psi_N(x_1)\,\psi_N(x_2) = $$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{L-L_+}{2} + 1\right]\psi_N(x_1)\,\psi_N(x_2). \qquad (2,17)$$

**4.** В рассмотренных задачах появился дифференциальный оператор $L$. Его действие на $\psi(x_1)\,\psi(x_2)$ при $x_1 = x_2$ можно записать в интегральной форме. Покажем это.

Пусть $\psi_E(x)$ удовлетворяет уравнению Шредингера $\psi_E'' + 2(E-V)\times \times\psi_E = 0$. Диагональный элемент $L\psi_E(x_1)\,\psi_E(x_2)$ выражается равенством

$$L\psi_E(x_1)\,\psi_E(x_2)\big|_{x_1=x_2} = 2(E-V)\,\psi_E^2 + \psi_E'^2, \qquad (2,18)$$

где использовано уравнение Шредингера. С другой стороны, уравнение Шредингера можно (домножая на $\psi_E$) преобразовать к виду

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\psi'^2 + \frac{d}{dx}(E-V)\,\psi^2 + \psi^2\frac{\partial V}{\partial x} = 0.$$

Теперь, интегрируя по $x$ от $-\infty$, получим

$$\psi'^2 + 2(E-V)\,\psi^2 = 2\int\limits_{-\infty}^{x}\psi(x)\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\psi(x)\,dx + \left[\psi'^2 + 2(E-V)\,\psi^2\right]_{x=-\infty}.$$

Внеинтегральный член есть постоянная, которую можно определить из асимптотики $\psi(x)$ при $x \to -\infty$. Таким образом, диагональный элемент $L\psi_1\psi_2$ имеет интегральный вид

$$L\psi(x_1)\,\psi(x_2)\big|_{x_1=x_2=x} = 2\int\limits_{-\infty}^{x}\psi\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\psi\,dx + A. \qquad (2,19)$$

Для осциллятора, например, это тождество приводит к интегральному соотношению для плотности

$$\rho_N(x, x) = -\int\limits_{-\infty}^{x} x\psi_N^2\,dx + \frac{1}{2}\psi_N^2(x) = -\sqrt{\frac{N+1}{2}}\int\limits_{-\infty}^{x}\psi_N\psi_{N+1}\,dx. \qquad (2,19\text{a})$$

Итак, в трех рассмотренных случаях матрица плотности связана с не зависящим от энергии оператором $L$, который определяет полуклассическую асимптотику $\rho_E(x, x')$. Действительно, для свободной частицы и однородного поля матрица плотности выражает через $L$ точно, а следовательно и асимптотически. Для осциллятора $L$ дает полуклассическую асимптотику, поскольку $L$ — дифференциальный оператор, а при $\hbar \to 0$ справедливо неравенство: $\psi' \gg \psi$. Кажется правдоподобным, что оператор $L$ можно использовать для получения полуклассической асимптотики в задачах с потенциалами, отличными от рассмотренных.

## § 3. Трехмерные задачи

**1.** Пусть потенциал имеет вид „желоба“, т. е. по одной из координат действует поле $V(x)$, а движение по двум другим координатам свободное. Это соответствует реальным задачам типа однородного поля. В подобных случаях удобно рассматривать частично диагонализированную матрицу, т. е.

$$\rho_E^{(3)}(x,\ y,\ z;\ x',\ y_1',\ z')\to\rho_E^{(3)}(x;\ x';\ y,\ z)=\rho_E^{(3)}(x,\ x'),$$

поскольку диагональные элементы, соответствующие свободному движению, не зависят от координат.

Пусть потенциал таков, что спектр по $x$ сплошной. Тогда

$$\rho_E^{(3)}(x,\ x')=\int\limits_{-\infty}^{E}dF_x\,\psi^*(x')\,\psi(x)\int\limits_{-\infty}^{E-E_x}dE_y\,|\psi_{E_y}|^2\int\limits_{-\infty}^{E-E_x-E_y}dE_z\,|\psi_{E_z}|^2,\qquad(3{,}1)$$

$$\text{где }\psi_E(z)=\alpha^{1/2}E^{-1/4}e^{i\alpha E^{1/2}z},\quad \alpha=\left(\frac{8\pi^2\hbar^2}{m}\right)^{-1/2},$$

причем $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_E^*(z)\,\psi_{E'}(z)\,dz=\delta(E-E')$.

Интегралы, соответствующие свободному движению, дают множитель

$$\alpha^2\pi\,(E-E_x),\qquad(3{,}2)$$

подставляя который в (3,1), получим

$$\rho^{(3)}(x,\ x')=\alpha^2\pi\int\limits_{-\infty}^{E}\int\limits_{-\infty}^{E_1}\psi_{E_2}^*(x)\,\psi_{E_2}(x')\,dE_2dE_1+$$

$$+\alpha^2\pi\left[E_1\int\limits_{-\infty}^{E_1}\psi_{E_2}^*(x)\,\psi_{E_2}(x')\,dE_2\right]_{E_1=-\infty}.\qquad(3{,}3)$$

Постоянную добавку можно не рассматривать. Тогда, вспоминая, что выражение типа $\int\limits_{-\infty}^{E}\psi_E^*(x')\,\psi_E(x)\,dE$ есть матрица плотности соответствующей одномерной задачи, перепишем (3,3) в виде

$$\rho_E^{(3)}(x,\ x')=\alpha^2\pi\int\limits_{-\infty}^{E}\rho_E^{(1)}(x,\ x')\,dE,\qquad(3{,}4)$$

т. е. трехмерный случай элементарным образом сводится к одномерному.

Используя (3,4), решим задачу о матрице плотности однородного поля. По аналогии с одномерной матрицей выразим ее через функции с максимальной энергией. Поскольку оператор $L$ не зависит явно от энергии, его можно вынести за знак интеграла, т. е.

$$\rho_E^{(3)}(x,\ x')=\alpha^2\pi\int\limits_{-\infty}^{E}\rho_E^{(1)}(x,\ x')\,dE=\alpha^2\pi\int\limits_{-\infty}^{E}\frac{L}{2}\,\psi_E(x)\,\psi_E(x')\,dE=$$

$$=\alpha^2\pi\left(\frac{1}{2}L\right)^2\psi_E(x)\,\psi_E(x').\qquad(3{,}5)$$

Отсюда для диагональных элементов получаем выражение

$$\rho_E^{(3)}(x,\ x)=\frac{2\alpha^2\pi}{3}\left[4\,(E+x)^2\,\psi_E^2-\frac{1}{2}\,\psi_E\psi_E'+2\,(E+x)\,\psi'^2\right].\qquad(3{,}5а)$$

Аналогичным образом рассмотрим матрицу плотности осцилляторного „желоба“. Учитывая (3,2), представим искомую матрицу в виде

$$\rho_E^{(3)}(x, x') = \alpha^2\pi \sum_{n=0}^{[E-1/2]=N} (E - E_n)\psi_n(x)\psi_n(x') =$$

$$= \alpha^2\pi \sum_{n=0}^{N} (N-n)\psi_n(x)\psi_n(x') + \alpha^2\pi\left(E - N + \frac{1}{2}\right)\sum_{n=0}^{N}\psi_n(x)\psi_n(x') =$$

$$= \rho_N^{(3)}(x, x') + \alpha^2\pi\Delta E\rho_E^{(1)}(x, x'), \qquad (3,6)$$

где по-прежнему $\hbar = \omega = m = 1$.

Видно, что наиболее интересно вычислить первый член, поскольку выражение для $\rho_N^{(1)}$ уже получено в (2,15). Замечая, что

$$\sum_{n=0}^{N} (N-n)\psi_n(x)\psi_n(x') = \sum_{n=0}^{N}\sum_{k=0}^{n}\psi_k(x)\psi_k(x'), \qquad (3,7)$$

сводим задачу к одномерной:

$$\sum_{n=0}^{N}\sum_{k=0}^{n}\psi_k(x)\psi_k(x') = \sum_{n=0}^{N}\frac{1}{2}(L+1)\psi_n(x)\psi_n(x') =$$

$$= \left[\frac{1}{2}(L+1)\right]^2\psi_N(x)\psi_N(x').$$

Таким образом, для осцилляторного „желоба“ справедливо тождество

$$\rho_N^{(3)}(x, x') = \alpha^2\pi\left[\frac{1}{2}(L+1)\right]^2\cdot\psi_N(x)\psi_N(x'), \qquad (3,8)$$

или для диагональных элементов

$$\sigma_N^{(3)}(x, x) = \alpha^2\pi\frac{2N+1-x^2}{3}\left[\psi_N'^2 + (2N+1-x^2)\psi_N^2\right]. \qquad (3,8a)$$

**2.** Перейдем к рассмотрению других трехмерных задач. Будем строить для них полную матрицу в отличие от предыдущего, где искалась частично диагонализированная матрица.

Прежде всего найдем матрицу плотности свободной частицы. Этот случай рассматривал Фрёман [4], но мы приведем его формулу к виду, содержащему операторы $L$ и $L_+$.

По аналогии с одномерным случаем будем рассматривать свободную частицу как предел частицы в трехмерной прямоугольной яме, при глубине и ширине, стремящихся к бесконечности. Для простоты воспользуемся функциями, нормированными на $\delta^3(\vec{k} - \vec{k'})$

$$\psi_k(\vec{r}) = \begin{cases} (2\pi)^{-3/2}\sin(\bar{k}, \bar{r}), \\ (2\pi)^{-3/2}\cos(\bar{k}, \bar{r}). \end{cases} \qquad (3,9)$$

Далее, вычислим четную и нечетную части матрицы плотности:

$$\rho_E^{\text{неч}}(\bar{r}, \bar{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\sin(\bar{k}, \bar{r})\sin(\bar{k}, \bar{r}')\overline{dk} =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^2}\left[-\frac{k\cos k|\bar{r}-\bar{r}'|}{|\bar{r}-\bar{r}'|^2} + \frac{\sin k|\bar{r}-\bar{r}'|}{|\bar{r}-\bar{r}'|^3}\right] -$$

$$-\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^2}\left[-\frac{k\cos k|\bar{r}+\bar{r}'|}{|\bar{r}+\bar{r}'|^2} + \frac{\sin k|\bar{r}+\bar{r}'|}{|\bar{r}+\bar{r}'|^3}\right]. \qquad (3,10)$$

Это выражение не отличается от соответствующей формулы Фрёмана. Сделаем замену переменных, вводя $x$ и $y$ по формулам

$$x \equiv \frac{|\bar{r}_1 + \bar{r}_2| + |\bar{r}_1 - \bar{r}_2|}{2}, \quad y \equiv \frac{|\bar{r}_1 + \bar{r}_2| - |\bar{r}_1 - \bar{r}_2|}{2}. \qquad (3,11)$$

Эти перемненые как бы снимают знак модуля

$$|\bar{r}_1+\bar{r}_2|=x+y, \quad |\bar{r}_1-\bar{r}_2|=x-y.$$

В новых переменных

$$\rho_E^{\text{неч}}(x, y)=\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^2}\left\{\left[\frac{\sin k(x-y)}{(x-y)^3}-\frac{k\cos k(x-y)}{(x-y)^2}\right]-\right.$$
$$\left.-\left[\frac{\sin k(x+y)}{(x+y)^3}-\frac{k\cos k(x+y)}{(x+y)^2}\right]\right\}.$$

Запишем последнее выражение компактнее, используя $L$ и $L_+$ и функции $\frac{\sin kx}{\sqrt{2\pi k}}$, $\frac{\cos kx}{\sqrt{2\pi k}}$, являющиеся нормированными по энергии решениями одномерных задач в переменных $x$ и $y$. При этом получим

$$\rho_E^{\text{неч}}\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\frac{1}{4\pi}\left(L^2-L_+^2\right)\frac{\sin kx}{\sqrt{2\pi k}}\frac{\sin ky}{\sqrt{2\pi k}}=$$
$$=\frac{1}{4\pi}\left(L^2-L_+^2\right)\psi_E^{\text{неч}}(x)\psi_E^{\text{неч}}(y), \tag{3,12}$$

и аналогичным образом

$$\rho_E^{\text{чет}}\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\frac{1}{4\pi}\left(L^2+L_+^2\right)\psi_E^{\text{чет}}(x)\psi_E^{\text{чет}}(y). \tag{3,12a}$$

Складывая (3,12) и (3,12а) и выражая сумму через имеющую „больше“ узлов нечетную функцию, получим окончательно

$$\rho_E\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\frac{1}{2\pi}L^2\psi_E(x)\psi_E(y), \tag{3,13}$$

где $\psi_E(x)=\frac{\sin kx}{\sqrt{2\pi k}}$.

Интересно, что матрица плотности трехмерного изотропного осциллятора также является функцией $x$ и $y$, т. е. зависит только от двух переменных, вместо трех. Волновое уравнение в этом случае

$$\Delta\Psi+(2N+3-r^2)\Psi=0.$$

Оно разделяется в декартовой системе координат, так что

$$\Psi_N\left(\vec{r}\right)=\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3), \tag{3,14}$$

причем $n_1+n_2+n_3=N$. Матрица плотности запишется в виде двойной суммы

$$\rho_N^{(3)}\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\sum_{m=0}^{N}\sum_{n_1+n_2+n_3=m}\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_1}(x_1')\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_2}(x_2')\psi_{n_3}(x_3)\psi_{n_3}(x_3')=$$
$$=\sum_{m=0}^{N}\Omega_m\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) \tag{3,15}$$

(рассматриваем замкнутые оболочки).

Вычислим $\Omega_m\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)$, воспользовавшись билинейной производящей функцией Мёллера для полиномов Эрмита [3]

$$\sum_{n=0}^{\infty}t^n h_n(x)h_n(x')=\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\exp\left\{\frac{2xx't-(x^2+x'^2)t^2}{1-t^2}\right\}, \tag{3,16}$$

где $h_n(x)=\frac{1}{(2^n n!)^{1/2}}H_n(x)$ — нормированный полином Эрмита. Эта формула естественно вытекает из свойств симметрии осциллятора [5]. Перемножим три выражения (3,16), записанные в нужных переменных, тогда получим производящую функцию для $\Omega_m\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)$

$$\sum_{m=0}^{\infty} t^m \Omega_m(\bar r, \bar r') = (1-t^2)^{-\frac{3}{2}} \exp\left\{\frac{2(\bar r, \bar r')t - (r^2+r'^2)t^2}{1-t^2}\right\} \times$$
$$\times \exp\left\{-\frac{r^2+r'^2}{2}\right\}. \tag{3,17}$$

Перейдем к переменным $x$ и $y$ по правилу (3,11). Тогда $2(\bar r, \bar r') = 2xy$, $r^2 + r'^2 = x^2 + y^2$, и правую часть (3,17) можно рассматривать как произведение двух функций

$$\left\{\frac{1}{1-t^2}\right\}\left\{\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\exp\left[\frac{2xyt-(x^2+y^2)t^2}{1-t^2}\right]\exp\left[-\frac{x^2+y^2}{2}\right]\right\}.$$

Используя (3,16) для разложения в ряд второго сомножителя и разлагая $\frac{1}{1-t^2}$, получим

$$\Omega_m(\bar r, \bar r') = \sum_{k=0}^{\left[\frac{m}{2}\right]} \psi_{m-2k}(x)\psi_{m-2k}(y), \tag{3,18}$$

где $\psi_n(x)$ — решения одномерного осциллятора. Суммы типа (3,18) уже встречались в (2,16) и, учитывая это, находим

$$\Omega_m(\vec r, \vec r') = \frac{1}{2}(M+1)\psi_m(x)\psi_m(y). \tag{3,19}$$

Оператор $M$ не зависит явно от индекса суммирования, поэтому в (3.15) его можно вынести за знак суммы, т. е.

$$\rho_N^{(3)}(\bar r, \bar r') = \sum_{m=0}^{N} \frac{1}{2}(M+1)\psi_m(x)\psi_m(y) =$$
$$= \frac{1}{2}(M+1)\frac{1}{2}(L+1)\psi_N(x)\psi_N(y). \tag{3,20}$$

Для диагональных элементов это равенство приобретает вид

$$\rho_N^{(3)}(r) = \frac{1}{4}\left(\frac{\beta^2}{3} + \frac{3}{2}\beta + \frac{5}{3}\right)\psi_N^2(r) - \left(\frac{1}{3}r + \frac{1}{2r}\right)\psi_N(r)\psi_N'(r) +$$
$$+ \left(\frac{\beta}{3} + \frac{3}{2}\right)\psi_N'^2(r), \tag{3,20a}$$

где обозначено $2N + 1 - r^2 \equiv \beta$.

Итак, матрица плотности трехмерного осциллятора зависит только от двух переменных. Это справедливо для задачи об осцилляторе с произвольным числом измерений $s$. В $s$-мерном случае переменные $x^s$, $y^s$ надо вводить по правилу (3,11), определяя скалярное произведение как $\left(\vec r^{\,s}, \vec r^{\,s\prime}\right) = \sum_{\alpha=1}^{s} x_\alpha x_\alpha'$.

Рассмотрим задачу о матрице плотности кулонова поля. Оказалось возможным получить для этого случая компактное выражение матрицы плотности слоя в координатном представлении. В импульсном представлении аналогичное выражение было найдено В. А. Фоком [6].

Воспользуемся результатом работы [7], в которой было показано, что функция $G(\bar r_1, \bar r_2, k)$, удовлетворяющая уравнению

$$\left(\Delta_2 + \frac{2k\nu}{r_2} + k^2\right)G = \delta^3(\bar r_2 - \bar r_1), \tag{3,21}$$

где $\nu = (ka_1)^{-1}$, $a_1 = \frac{4\pi h^2}{mZe^2}$, и надлежащим условиям связи

$$\left.\begin{array}{l} r_2^{1/2} G(\bar{r}_1, \bar{r}_2, k) \to 0, \\ r_2^{1/2} \vec{r}_2 \vec{\nabla}_2 G(\bar{r}_1 \bar{r}_2, k) \to 0, \end{array}\right\} \text{при } r_2 \to 0$$

$$\left.\begin{array}{l} r_2 G(\bar{r}_1, \bar{r}_2, k) \to 0, \\ \vec{r}_2 \vec{\nabla}_2 G(\bar{r}_1, \bar{r}_2, k) \to 0 \end{array}\right\} \text{при } r_2 \to \infty$$

при $\mathrm{Jm}(k) > 0$, может быть записана в виде

$$G(\bar{r}_1, \bar{r}_2, k) = \frac{\Gamma(1-i\nu)}{4\pi(x-y)} \frac{1}{ik} \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\right) W_{i\nu, 1/2}(-2ikx)\, \mathrm{M}_{i\nu, 1/2}(-2iky). \tag{3,22}$$

В этой формуле

$$\begin{aligned} 2x &= r_1 + r_2 + |\bar{r}_1 - \bar{r}_2|, \\ 2y &= r_1 + r_2 - |\bar{r}_1 - \bar{r}_2|. \end{aligned} \tag{3,23}$$

Функции $W_{i\nu, 1/2}(-2ikx)$ и $\mathrm{M}_{i\nu, 1/2}(-2iky)$ удовлетворяют одномерному кулоновскому уравнению

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2k\nu}{z} + k^2\right) f = 0, \tag{3,24}$$

причем вронскиан $\frac{\Gamma(1-i\nu)}{ik} W_{i\nu, 1/2}(-2ikx)$ и $\mathrm{M}_{i\nu, 1/2}(-2iky)$ равен 1. Для аргументов этих функций при $\mathrm{Jm}(k) > 0$, $\mathrm{Re}(k) = 0$ справедливо неравенство

$$-2ikx \geqslant -2iky.$$

Поэтому $\frac{\Gamma(1-i\nu)}{ik} W_{i\nu, 1/2}(-2ikx)\, \mathrm{M}_{i\nu, 1/2}(-2iky)$ есть функция Грина при $x \geqslant y$ для уравнения (2,24).

Таким образом, формула (3,22) означает сведение задачи о трехмерной функции Грина к одномерной, т. е.

$$G^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k) = \frac{1}{4\pi} L G^{(1)}(x, y, k). \tag{3,25}$$

Это свойство позволяет вычислить трехмерную матрицу плотности кулонова поля.

Разложим обе части равенства (3,25) по полюсам, учитывая, что из-за дополнительного вырождения спектр трехмерной и одномерной задач совпадают, тогда

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l, m=0}^{n} \frac{\psi_{nem}(\vec{r}_1)\, \psi_{nem}(\vec{r}_2)}{E - E_n} + S^{(3)} = L \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n(x)\, \psi_n(y)}{E - E_n} + L S^{(1)}, \tag{3,26}$$

где $S^{(3)}$ и $S^{(1)}$ — интегралы по сплошному спектру. Сравнение вычетов в полюсах дает

$$\sum_{m, l=0}^{n} \psi_{nem}(\vec{r}_1)\, \psi_{nem}(\vec{r}_2) = L \psi_n(x)\, \psi_n(y). \tag{3,27}$$

Таким образом, трехмерная матрица плотности выражается через одномерную

$$\rho_n^{(3)}(\vec{r}_1\; \vec{r}_2) = L \rho_n^{(1)}(x, y). \tag{3,28}$$

Отметим, что повторяя эти рассуждения в обратном порядке, можно, учитывая (3,19), получить в замкнутой форме функцию Грина трехмерного изотропного осциллятора.

## § 4. Заключение

Полученные результаты позволяют предложить метод построения полуклассической асимптотики матрицы плотности.

В рассмотренных одномерных задачах, как следует из (2,5), (2,10) и (2,15), матрица плотности конструируется из операторов, действующих на функции с граничной энергией. При этом вид оператора мало меняется в различных полях, и основную информацию о специфике задачи несут волновые функции. Но волновые функции можно достаточно хорошо апроксимировать полуклассически через функции свободной частицы, однородного поля, осциллятора. Поэтому предлагается в качестве апроксимирующих операторов брать операторы из (2,5), (2,10) и (2,15) и считать, что асимптотика матрицы плотности дается произведением этих операторов на приближенные волновые функции.

Построим по этому рецепту плотность в приближении свободной частицы. Тогда

$$\rho_E(x,\ x) = -\psi_E(x)\psi''_E(x) + \psi'^2_E(x), \tag{4,1}$$

где

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi p}} \sin\frac{1}{2}K,\quad p = \sqrt{2(E-V)},\quad \frac{1}{2}K = \int_{x_0}^{x} p\,dx + \alpha_0.$$

Подставляя конкретный вид функции в (4,1), получим

$$2\pi\rho_E(x) = p(x) + f_E(x)(1-\cos K) + g_E(x)\sin K, \tag{4,2}$$

где

$$f_E(x) = \frac{1}{2p}\frac{\partial}{\partial x}\frac{p'}{2p},\quad g_E(x) = -\frac{p'}{4p}.$$

Формула (4,2) совпадает с формулой, предложенной в работе [8]. В той же работе проводилось численное сравнение (4,2) с точным выражением для осциллятора. Оказалось, что уже при $N=3$ погрешность формулы в классической области менее 0,5% значения при $x=0$. Это позволяет надеяться, что предложенный рецепт окажется достаточно точным.

По аналогии с (3,13), (3,20) и (3,28) его можно распространить и на трехмерные задачи.

**Summary**

Exact expressions for the density matrix ($DM$) for the system consisting of non-interacting fermions in some fields are investigated. One- and three-dimensional problems are solved. For the first time the $DM$ for the three-dimensional isotropic oscillator and the $DM$ for the Coulomb shell in the coordinate representation are obtained in closed form. Semi-classical asymptotics of the $DM$ is discussed.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
2. П. Дирак. Основы квантовой механики. М—Л, ОНТИ, 1-е издание, 1932.
3. Г. Сеге. Ортогональные многочлены. М., Физматгиз, 1962.
4. P.-O. Fröman. Ark. Fyzik, **5**, 135, 1952.
5. Ю. Н. Демков. ЖЭТФ, **36**, 88, 1959.
6. В. А. Фок. Изв. АН СССР, серия физич., **2**, 169, 1935.
7. L. Hostler, R. H. Pratt. Phys. rev. lett., **10**, 469, 1963.
8. H. Payne. J. chem. phys., **38**, 2016, 1963.

Статья поступила в редакцию 30 июня 1964 г.