

О. С. Е р к о в и ч

МЕТОД МНОГОЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ПЛОТНОСТИ: ВИД ФУНКЦИОНАЛА КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ

Рассмотрен метод, представляющий собой обобщение теории функционалов плотности, основанный на представлении энергии системы как функционала диагонального элемента многочастичной матрицы плотности и позволяющий учесть обменно-корреляционные эффекты в системе. Приведен способ построения функционала кинетической энергии основного состояния системы фермионов.

Method of multi-partial functionals of density: functional of kinetic energy / O.S. Erkovich // Vestnik MGTU. Natural Sciences. 2000. No. 2. P. 73–79.

Presented method is a generalization of the density functional theory based on representing the system energy as a functional of diagonal elements of the multi-partial matrix of density. The said method allows to take into consideration the exchange-correlation effects in the system. Approach to compose a functional of kinetic energy of the fermion system full state, is described. Refs.8.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И с л е д о в а н и е корреляционных свойств многочастичных систем в рамках метода двухчастичных функционалов плотности / О.С. Еркович, В.В. Комаров, А.М. Попова и др. // Вестник МГУ. Сер. 3: Физ., Астрон. – 1991. – Т. 32., – № 4. – С. 42–49.
2. А н а л и з адсорбции заряженных частиц в методе двухчастичной плотности / О.С. Еркович, В.В. Комаров, А.М. Попова и др. // Поверхность. – 1993. – № 2. – С. 5–9.
3. Е р к о в и ч О. С. Обобщенная теорема Хоэнберга–Кона в многочастичном методе функционалов плотности // Деп. в ВИНТИ, № 1556-В94 от 22.06.94. – 18 с.
4. D r e i z l e r R. M., G r o s s E. K. U. Density functional theory. – Berlin: Springer-Verlag, 1990. – 303 p.
5. Т е о р и я неоднородного электронного газа: Пер. с англ. / Под ред. С. Лундквиста и Н. Марча. – М.: Мир, 1987. – 400 с.
6. К и р ж н и ц Д. А. Полевые методы теории многих частиц. – М.: Госатомиздат, 1963. – 344 с.
7. Б р о н ш т е й н И. П., С е м е н д я е в К. А. Справочник по математике. – М.: Наука, 1986. – 544 с.

8. Р и д М., С а й м о н Б. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов: Пер. с англ. – М.: Мир. – 1982. – 428 с.

Статья поступила в редакцию 27.10.1999

Ольга Станиславовна Еркович родилась в 1962 г., окончила в 1984 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Имеет 38 научных работ в области нерелятивистской квантовой механики.

O.S. Erkovich (b. 1962) graduated from the Lomonosov Moscow State University in 1984. Ph. D. (Phys.-math.), ass. professor of “Physics” Department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 38 publications in the field of non-relativistic quantum mechanics.