

УДК 539.19+539.2

О. С. Е р к о в и ч

ФОРМУЛИРОВКА ВАРИАЦИОННОГО ПРИНЦИПА В МЕТОДЕ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ПЛОТНОСТИ

Рассмотрена применимость вариационных подходов к методу многочастичных функционалов плотности. Результаты приведены в виде общей теоремы, которая может быть рассмотрена в рамках данного метода как основополагающая.

Formulation of variational principle for the method of many-particle density functionals / O.S. Erkovich // Vestnik MGTU. Natural Sciences. 2000. No. 1. P. 84–96.

Adaptability of variational approaches in the method of many-particle density functionals is considered. The results are presented in the form of general theorem that can be analysed as a basic one within the framework of this method. Refs.8. Figs.1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Теория неоднородного электронного газа: Пер. с англ. / Под ред. С. Лундквиста и Н. Марча. – М.: Мир, 1987. – 400 с.
2. Dreizler R. M., Gross E.K.U. Density functional theory. – Berlin: Springer-Verlag, 1990. – 303 p.
3. Parr R. G., Yang W. Density-functional theory of atoms and molecules. – New York: Oxford University Press, 1989. – 333 p.
4. Е р к о в и ч О. С., К о м а р о в В. В., П о п о в а А. М. Анализ пространственной структуры электронного газа вблизи поверхности металла в методе двухчастичных функционалов плотности // Поверхность. – 1994. – № 10. – С. 23–28.
5. А д с о р б ц и я заряженных частиц на поверхности металлов в методе многочастичных функционалов плотности / Гаджиев А.М., Е р к о в и ч О.С., К о м а р о в В.В., П о п о в а А.М. // Вестник МГУ. Сер. 3: Физ., Астрон. – 1990. – Т. 31. – № 4. – С. 73–75.
6. В л и я н и е адсорбированного водорода на структуру электронного газа вблизи поверхности металла // Е р к о в и ч О.С., К о м а р о в В.В., П о п о в а А.М. и др. / Вестник МГУ. Сер. 3. Физ. Астрон. – 1996. – Т. 37. – № 4. – С. 77–80.
7. K o h n W. v -Representability and density functional theory // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V. 51, no. 4. – P. 1596–1598.

8. L e v y M. Electron densities in search of Hamiltonians // Phys. Rev. A. – 1982. – V. 26, no. 3. – P. 1200–1208.

Статья поступила в редакцию 27.10.1997

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 37 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 37 publications in the field of non-relativistic quantum mechanics.