ISSN 2411-720X (Print)
ISSN 2413-0834 (Online)

УДК 539.192(043.3)

Метод координатной функции Фока, интегральные соотношения между спиновыми и зарядовыми плотностями, их свойства

Климко Г.Т.
Донецкий национальный технический университет
gtklimko@mail.ru

Климко Г.Т. «Метод координатной функции Фока, интегральные соотношения между спиновыми и зарядовыми плотностями, их свойства». *Следующее из метода координатной функции Фока общее интегральное соотношение между её редуцированными матрицами плотности (РМП) различного порядка, полученное в предыдущей статье, применено для вывода интегральных соотношений между спиновыми и зарядовыми плотностями. Эти соотношения найдены решением предложенной системы уравнений в базисе РМП координатных функций Фока. Предыдущий результат применен, чтобы частичные свёртки зарядовых плотностей с транспозициями разложить по базису указанных РМП. Особенностью найденных соотношений является наличие неоднозначности в их записи. Доказана их тождественность. Все выводы проведены только с плотностями, зависящими от пространственных координат. Развитый подход дополнил методы квантовой механики без спина новым способом получения спиновых распределений. Для вычисленных значений свёрток двух-, трёх- и четырёхчастичных матриц зарядовой плотности с транспозициями, действующими на них с одной стороны, обсужден физический смысл. Результаты точные. Уместно применять их для проверки и корректности построения зарядовых плотностей и принадлежности приближённой модельной функции чистому спиновому состоянию.*

Ключевые слова: квантовая механика без спина, зарядовые и спиновые плотности, интегральные соотношения.

Введение

Скрытые возможности и координатной [1], и производящей [2] функций Фока, обобщённой в [3] на редуцированные матрицы плотности порядка p (РМП-p), изучались в [3 – 11].

Производящая функция Фока для РМП-p между состояниями $\Psi_{s'M'}$ и $\Psi_{sM'}$ со спином, s', s, и проекцией, $-s' \le M' \le s'$, $-s \le M \le s$, соответственно, даёт общую связь её пространственной компоненты, $L^{(p)}_{s\nu,M\mu,t}$, $\mu = M' - M$, стоящей при допустимом спиновом множителе, с главными её компонентами $L^{(p)}_{s,\nu,\tau}$, (17) в [11]. Компонента $L^{(p)}_{s,\nu,\tau}$ для функций Фока $\Phi_{s'}$ и Φ_s равна:

$$L^{(p)}_{s,\nu,\tau\tau'}\left(\{i\}_\tau * \{j\}_{p-\tau} \middle| \{i'\}_{\tau'} * \{j'\}_{p-\tau'}\right) = \\ = L^{(p)}_{s,\nu,\tau} = \frac{\sqrt{(n+s')!(n-s')!(n+s)!(n-s)!}}{p!(n+s'-\tau)!(n-p-s'+\tau)!} \times \\ Sp_r^{2n-p}\left\{\Phi_{s'}\left(\ldots\{i\}_\tau \middle| \{j\}_{p-\tau}\ldots\right)\Phi_s^*\left(\ldots\{i'\}_{\tau'} \middle| \{j'\}_{p-\tau'}\ldots\right)\right\}. \quad (1)$$

Здесь $\nu = s' - s = \tau - \tau'$, и пространственные не штрихованные и штрихованные координаты частиц, стоящие до и после черты в функциях $\Phi_{s'}$ и Φ_s, указаны их номерами: $\{i\}_\tau \cup \{j\}_{p-\tau} = \{1,2,\ldots,p\}$ и $\{i'\}_{\tau'} \cup \{j'\}_{p-\tau'} = \{1',2',\ldots,p'\}$, как в [11].

Другой результат [11] – это общее интегральное соотношение (ОИС), следующее из условий циклической симметрии $\Phi_{s'}$ и Φ_s. Оно свёртку РМП-q, определяемой (1), но с q вместо p, по координатам $q - p = (k+l+u+u')$ частиц, когда часть из них, $\{k\}$ и $\{l\}$, расположена в $\Phi_{s'}$ и в Φ_s одинаково, $\{k\}$ – до и $\{l\}$ – после черты, а интегрируемые переменные других частиц, $\{u\}$ и $\{u'\}$, расположены в них не одинаково – по разные стороны от черты, выражает через РМП $L^{(p)}_{s,\nu,\tau}$ (1), у которых τ и $\tau' = \tau - \nu$ частиц из наборов $\{\{i\}\cup\{j\}\}_p$ и $\{\{i'\}\cup\{j'\}\}_{p'}$ стоят в $\Phi_{s'}$ и Φ_s до черты, и возможные значения τ в них ограничены, $max\{0, \nu, \rho - u'\} \le \tau \le \min\{\rho, \rho' + \nu\}$. Антисимметрию $L^{(p)}_{s,\nu,\tau}$ для наборов $\{i\}_\rho$, и $\{i'\}_{\rho'}$ в правой части ОИС, формулы (35) в [11], восстанавливают антисимметризаторы $\widehat{A}_\rho$ и $\widehat{A}'_{\rho'}$. В левой части ОИС её имеет интегрируемая РМП-q:

$$L^{(q)[u,u']}_{s,\nu,t(\rho\rho')} = L^{(q)[u,u']}_{s,\nu,t}\left(\{k\}\{u\}\{i\}_\rho * \{j\}_{p-\rho}\{u'\}\{l\} \middle| \\ \middle| \{k\}\{u'\}\{i\}_{\rho'} * \{j\}_{p-\rho'}\{u\}\{l\}\right) = \frac{\sqrt{(n+s')!(n-s')!}}{q!(n+s'-t)!} \times \\ \frac{\sqrt{(n+s)!(n-s)!}}{(n-q-s'+t)!} Sp_r^{N-q}\left\{\Phi_{s'}\left(\{k\}\{u\}\{i\}_\rho \middle| \{j\}_{p-\rho}\{u'\}\{l\}\right) \\ \times \Phi_s^*\left(\{k\}\{u'\}\{i'\}_{\rho'} \middle| \{u\}\{j'\}_{p-\rho'}\{l\}\right)\right\}. \quad (2)$$

В (2) числа $t = k + u + \rho$ и $t' = k + u' + \rho'$ заменяют τ и τ' из (1), $\nu = \tau - \tau' = t - t'$, а в обозначении совокупностей интегрируемых переменных $\{k\}$, $\{l\}$, $\{u\}$ и $\{u'\}$ в скобках указан их размер.

Если $u = u' = 0$ и $k + l = q - p$, ОИС даёт обычную свёртку (21) из [11] для РМП-q функций Фока, а при $\{u\} \ne \varnothing$ и/или $\{u'\} \ne \varnothing$ – нетривиальное интегральное соотношение (НИС).

Эта работа продолжает статью [11].

Здесь предложен способ получения связей тензорных пространственных компонент РМП-p, $R^{(p)0}_{(\gamma)\omega}$, со свёртками от пространственных компонент РМП-q для тех же состояний, но большей частичности, $q>p$, того же или другого ранга, среди которых могут быть и только зарядовые плотности. При $p \geq 2$ обнаружена множественность форм их записи. Установлена причина этого. Показано, что все они эквивалентны.

Это задача «квантовой механики без спина» [12], которая решена здесь методом координатной функции Фока [1 – 11]. В нём из функций Фока строят и спиновые плотности $R^{(p)0}_{(\gamma)\omega}$ с $\omega \neq 0$, и зарядовую плотность, $R^{(p)}_{sM}$ с $\omega = 0$:

$$R^{(p)}_{sM}(1,...,p|1',...,p') = R^{(p)0}_{(\gamma)0} = \sum_{\tau}(p!)^{-1}\cdot\binom{p}{\tau}\cdot \sum_{Q\in\pi_p}\hat{Q}\cdot L^{(p)}_{s,0,\tau}(1,...,\tau *...,p|1',...,\tau' *...,p')\cdot\hat{Q}^{+}. \tag{3}$$

Она не зависит от M (в уравнении (19) согласно [11] величина $\binom{p}{\tau}$ отсутствует).

Ранее с помощью метода Фока получены разложения [3, 5] по матрицам Матсена-Пошусты [13] для одно- и двухчастичных зарядовых, ρ_s и $R_s = R$, спин-орбитальной $D_{ss} = D$, спин-спиновой $F_{ss} = F$ и спиновой $d_{ss} = d$ плотностей. Они замещают вычисления сумм с одно и двух частичными генеалогическими коэффициентами для симметрической группы.

Частные случаи нетривиальных интегральных соотношений

При $p = 2$, $s' = s$, $u = u'$, $\rho = \rho' = 1, 2$, ОИС (35) из [11] для РМП функций Фока $\Phi_{s'}$ и Φ_s воспроизводят вспомогательные интегральные соотношения (5.6) – (5.8) из [4]. Полная свёртка в (2) с $q = 2n$, $s' = s$ и $u = u'$, когда функции отличаются u транспозициями, даёт тождества

$$Sp^{2n}_{r}\left\{L^{(2n)[u,u]}_{s,0,0,(00)}\right\} = \binom{n+s}{u}^{-1},\ u \leq n-s. \tag{4}$$

Если $\langle\Phi_s|\Phi_s\rangle = 1$, они гарантируют нормировку функций Φ_{sM}, (7) в [11], для всех M, $-s < M < s$:

$$\langle\Phi_{sM}|\Phi_{sM}\rangle = \binom{n-M}{n-s}\cdot\binom{n+s}{n+M}\cdot\binom{2s}{s+M}^{-1}\times \times\langle\hat{A}_{n-M}\Phi_s|\hat{A}_{n-M}\Phi_s\rangle = 1. \tag{5}$$

Такое значение (5) получим, если учтем разложение (3) из [11] для $\hat{A}_{n-M} = (\hat{A}_{n-M})^2$, в (5) действующих на координаты $n - s$ последних частиц, ИС (4) и тождество (17.26) из [14]:

$$\sum_{u=0}^{\min\{n-s,s-M\}}(-1)^u\binom{n+s-u}{n-s-u}\cdot\binom{s-M}{u} = \binom{n+M}{n-s}, \tag{5'}$$

$$\langle\Phi_s|\hat{A}_{n-M}\Phi_s\rangle = \binom{n-M}{n-s}^{-1}\cdot\sum_{u=0}^{\min\{n-s,s-M\}}(-1)^u\times \binom{n-s}{u}\cdot\binom{s-M}{u}\cdot\binom{n+s}{u}^{-1} = \binom{n-M}{n-s}^{-1}\binom{n+s}{n+M}^{-1}\binom{2s}{s+M}.$$

Следующие частные случаи ОИС, связывающие свёртки (2) с (1), применены ниже.

Для $q = 3$, $p = 2$, $k = l = 0$, $[u, u'] = [1,0]$ или $[0.1]$ ОИС переходит в равенства:

$$Sp_3\left\{L^{(3)[1,0]}_{s,0,1(0,1)}\right\} = Sp_3\left\{L^{(3)[0,1]}_{s,0,1(1,0)}\right\} = -\tfrac{1}{3}L^{(2)}_{s,0,0}; \tag{6}$$

$$Sp_3\left\{L^{(3)[1,0]}_{s,0,2(1,2)}\right\} = -\tfrac{2}{3}L^{(2)}_{s,0,1}\hat{A}_{1'2'};\quad Sp_3\left\{L^{(3)[0,1]}_{s,0,2(2,1)}\right\} = -\tfrac{2}{3}\hat{A}_{12}L^{(2)}_{s,0,1}. \tag{6'}$$

Антисимметризаторы $\hat{A}_{12}$ и $\hat{A}_{1'2'}$ действуют соответственно на не штрихованные и штрихованные пространственные координаты частиц.

В случаях с $q = 4$ и $p = 2$, при ненулевом значении u и/или u', для свертки $L^{(4)[u,u']}_{s,v,t(\rho\rho')}$ по координатам третьей и четвёртой частиц, когда $k = 0$, $l = 1$ и $s' = s$, из ОИС следуют:

$$Sp_{34}\left\{L^{(4)[1,0]}_{s,0,1(0,1)}\right\} = Sp_{34}\left\{L^{(4)[0,1]}_{s,0,1(1,0)}\right\} = -\tfrac{n-s-2}{12}L^{(2)}_{s,0,0};$$
$$Sp_{34}\left\{L^{(4)[2,0]}_{s,0,2(0,2)}\right\} = Sp_{34}\left\{L^{(4)[0,2]}_{s,0,2(2,0)}\right\} = \tfrac{1}{6}L^{(2)}_{s,0,0}; \tag{7}$$
$$Sp_{34}\left\{L^{(4)[1,1]}_{s,0,2(1,1)}\right\} = \tfrac{1}{12}\left[(n-s-1)L^{(2)}_{s,0,1} - L^{(2)}_{s,0,0}\right],$$

а для $k = 1$ и $l = 0$ оно же даёт тождества:

$$Sp_{34}\left\{L^{(4)[1,0]}_{s,0,3(1,2)}\right\} = -\tfrac{n+s-2}{6}L^{(2)}_{s,0,1}\hat{A}_{1'2'};\quad Sp_{34}\left\{L^{(4)[0,1]}_{s,0,3(2,1)}\right\} = -\tfrac{n+s-2}{6}\hat{A}_{12}L^{(2)}_{s,0,1}. \tag{7'}$$

Нетривиальные интегральные соотношения для тензорных компонент

Преобразования от РМП-p функций Фока $L^{(p)}_{s,v,\tau}$ (1) к тензорным компонентам РМП $R^{(p)\mu}_{(\gamma)\omega}$, как в (18) из [11], обратимые. То есть РМП-p $L^{(p)}_{s,v,\tau}$ также однозначно разложимы по компонентам $R^{(p)v}_{(\gamma)\omega}$, с $\mu = v$, той же частичности.

Так, для всех компонент РМП–1 [3 – 5]:

$$L^{(1)}_{s,0,1} = l_{+} = \frac{\rho_s + sd_{ss}}{2};\ L^{(1)}_{s,0,0} = l_{-} = \frac{\rho_s + sd_{ss}}{2};\quad L^{(1)}_{s,-1,0} = l^{(-1)} = \sqrt{2s(2s-1)}\cdot d_{s-1,s}. \tag{8}$$

Здесь $\rho_s = R^{(1)}_s$ и d_s – зарядовая и спиновая плотности. С учётом симметрии диагональных по спину тензорных компонент РМП-2

$$R' = {}'R,\ (\text{или } R = {}'R'), \tag{9}$$

$$D + {}'D + D' + {}'D' = 0, \tag{9'}$$

$$F = -{}'F = -F' = {}'F', \tag{9''}$$

Климко Г.Т.
Донецкий национальный технический университет

ISSN 2411-720X (Print)
ISSN 2413-0834 (Online)

для них верны равенства:

$$
\begin{aligned}
L^{(2)}_{s,0,2} &= L_+ = \frac{R - R' + s(2s-1)F}{6} - \frac{s(D' + {}'D)}{4};\\
L^{(1)}_{s,0,0} &= L_- = \frac{R - R' + s(2s-1)F}{6} + \frac{s(D' + {}'D)}{4};\\
L^{(2)}_{s,0,1} &= \tfrac{1}{2}K = \frac{2R + R' - s(2s-1)F}{6} + \frac{s(D - {}'D')}{4}.
\end{aligned} \tag{10}
$$

Штрихи слева и/или справа от R, D и F обозначают перестановки их штрихованных и/или нештрихованных координат. Из (9) – (9'') следует, что зарядовая плотность бисимметрична, спин-орбитальную плотность нельзя симметризовать одновременно по нештрихованным и штрихованным переменным, спин-спиновая плотность антисимметрична в обоих наборах переменных. Множитель 1/2 при K в (10) согласован с (3).

Из ОИС, связывающего $L^{(q)[u,u']}_{s,\nu,t(\rho\rho')}$ с $L^{(p)}_{s,\nu,\tau}$, и таких равенств, как (3), (8) – (10), следуют ИС между тензорными компонентами РМП различного ранга и частичности. Процедура их вывода: под знаком свёртки по координатам $q - p$ частиц плотности $R^{(q)\nu}_{(\gamma)\omega}$ разложим по $L^{(q)}_{s,\nu,\tau}$, для интегралов с ними применить ОИС [11], и затем от РМП $L^{(p)}_{s,\nu,\tau}$ вернёмся к $R^{(p)\nu}_{(\gamma)\omega}$. Всё это выполнимо. Ряд уравнений, связывающих комбинации свёрток от $R^{(q)\nu}_{(\gamma')\omega'}$ с $R^{(p)\nu}_{(\gamma)\omega}$, в базисе $L^{(p)}_{s,\nu,\tau}$, который является общим для их левых и правых частей, будет итогом таких преобразований.

Связь каждой компоненты РМП-p с комбинацией нетривиальных свёрток даст решение системы таких линейных уравнений. В частности, решение для $R^{(p)\nu}_{(\gamma)\omega}$ будет зависеть только от зарядовых плотностей (3), если тензорные компоненты с $q > p$ в каждой свёртке по координатам $q - p$ частиц для любого уравнения системы имеют ранг $\omega' \equiv 0$. Это задача «квантовой механики без спина»? Разрешима ли она её же методами (без явного учёта спина)? Однозначна ли запись получаемых в ней результатов? Физическая причина для математической неоднозначности решений обсуждается ниже.

В [6] алгеброй спинов показана возможность из зарядовых плотностей большей частичности $R^{(q)}_s$ получать $R^{(p)0}_{(1^{p-\omega}\ldots)\omega}$, где $q = p + \omega$.

Любая $R^{(p)0}_{(\gamma)\omega}$ определяется из главной компоненты того же ранга, $R^{(p)0}_{(1^{p-\omega}\ldots)\omega}$, перестановками её координат только внутри «наборов» из штрихованных или нештрихованных координат. В общем виде это доказано в [15].

Неоднозначность записи интегрального соотношения (ИС) с $R^{(p)0}_{(\gamma)\omega}$ в [6] не обсуждалась. А у неё есть причины. Перестановочная симметрия пространственных компонент РМП-p ограничена принципом Паули. Он эквивалентен «характеру симметрии и антисимметрии» Хунда [16] для шредингеровской функции, как и применению в «квантовой механике без спина» [12, 14] двухстолбцовых схем Юнга. Вследствие этого пространственные тензорные компоненты, как и функции Фока, нельзя ни симметризовать по координатам более, чем двух электронов, ни антисимметризовать по координатам более, чем $n + s$ частиц.

Это порождает, в частности, линейные зависимости между двух частичными плотностями, получаемыми свёрткой из тензорных компонент большей частичности. Так, симметризованная по всем нештрихованным (или штрихованным) координатам частиц зарядовая плотность $R^{(3)0}_{(1^3)0}$, как и её свёртка по координатам любой частицы, уже равна нулю.

$$
Sp_3\left\{\sum_{P\in\pi_3}\hat{P}\cdot R^{(3)0}_{(1^3)0} = \sum_{P'\in\pi_3} R^{(3)0}_{(1^3)0}\cdot\hat{P}' \equiv 0\right\}. \tag{11}
$$

Учитывая в (11) бисимметричность зарядовой плотности $R^{(3)0}_{(1^3)0}$ (3) и её редукцию:

$$
R(1,2|1',2') = \frac{3}{N-2}Sp_3\left\{\sum_{P\in\pi_3} R^{(3)0}_{(1^3)0}(1,2,3|1',2',3)\right\}, \tag{12}
$$

для нетривиальной свёртки с плотностью $R^{(3)0}_{(1^3)0}$

$$
\begin{aligned}
Q &= Sp_3\left\{\hat{P}_{23}R^{(3)0}_{(1^3)0}(1,2,3|1',2',3)\right\} =\\
&Sp_3\left\{R^{(3)0}_{(1^3)0}(1,2,3|1',3,2')\right\} = Q(1,2|1',2'),
\end{aligned} \tag{13}
$$

получаем следующую зависимость

$$
\frac{N-2}{3}\cdot(R + R') + Q + {}'Q + Q' + {}'Q' = 0. \tag{14}
$$

Штрихи обозначают перестановки переменных, как в (10), $N=2n$ – число частиц в системе.

Тождество (14) станет тривиальным, если перейти в нём к РМП (1) для функций Фока. Такой переход для Q (13) следует из НИС (6), (6') после учёта (3) для $R^{(3)}_s$. Он имеет вид:

$$
\begin{aligned}
Q(1,2|1',2') &= -\frac{n+s-2}{3}L_+ - \frac{n-s-3}{6}K -\\
&-\frac{1}{6}(K' + {}'K) - \frac{n+s-1}{6}\,{}'K' - \frac{n-s-4}{3}L_-.
\end{aligned} \tag{15}
$$

Аналогичные связи для R, D, F известны [4]:

$$
\begin{aligned}
R &= L_+ + \frac{1}{2}(K + {}'K') + L_-;\\
D &= \frac{1}{s}\left[L_+ + \frac{1}{2}(K - {}'K') - L_-\right];\\
F &= \frac{1}{s(2s-1)}\left[L_+ - \frac{1}{2}(K - K' - {}'K + {}'K') + L_-\right].
\end{aligned} \tag{16}
$$

Климко Г.Т.
Донецкий национальный технический университет

Свёртки зарядовой плотности $R_s^{(4)} \equiv R^{(4)0}_{(1^4)0}$ (3) по координатам частиц 3 и 4, отличающиеся «односторонними» транспозициями, действующими на них, дополняют плотности $R_s^{(2)}$ и Q:

$$V(1,2|1',2') = Sp_{3,4}\left\{R^{(4)0}_{(1^4)0}(1,2,4,3|1',2',3,4)\right\};$$
$$W(1,2|1',2') = Sp_{3,4}\left\{R^{(4)0}_{(1^4)0}(3,4,1,2|1',2',3,4)\right\}. \qquad (17)$$

Учёт в правой части первой свёртки формулы (3), НИС (7) с $\rho = \rho'$, и редукции (21) [11] дают для V разложение, сводящееся к линейной комбинации R и R'. Плотность W не зависит от R и Q. Это видно, например, из действия $\widehat{P}^{\,r}$ на РМП-4 в спин-орбитальном пространстве:

$$\widehat{P}^r \Gamma^{(4)}(x_1,\ldots,x_4|x_1',\ldots,x_4') = \sum_{(\gamma)\omega\mu} \widehat{P}^r R^{(4)\mu}_{(\gamma)\omega} \widehat{T}^{(4)\mu}_{(\gamma)\omega}. \qquad (18)$$

Здесь $\widehat{T}^{(p)\mu}_{(\gamma)\omega}$ – спиновый тензор, $x = (r,\sigma)$. Действие $\widehat{P}^{\,r} = \widehat{P}^{r}_{3,4}$ или $\widehat{P}^{\,r} = \widehat{P}^{r}_{1,3}\widehat{P}^{r}_{2,4}$ переносится в (18) на спиновые координаты частиц и свёртка по координатам частиц 3 и 4 ведёт к РМП-2:

$$\Gamma^{(2)} = Sp^{r,\sigma}_{3,4}\left\{\widehat{P}^r \Gamma^{(4)}(x_1,\ldots,x_4|x_1',\ldots,x_4')\right\} =$$
$$= Sp^{r,\sigma}_{3,4}\left\{\sum_{(\gamma)\omega\mu} (\mp 1) R^{(4)\mu}_{(\gamma)\omega} \cdot \widehat{P}^{\sigma} \widehat{T}^{(4)\mu}_{(\gamma)\omega}\right\}. \qquad (18')$$

Знак зависит от чётности перестановки.

Транспозиции, переставляющие спины, зависят от произведений спиновых тензоров:

$$\widehat{P}^{\sigma}_{3,4} = -\tfrac{1}{2}\left[1 + 4\sum_{\mu=-1}^{1} \widehat{t}_1^{\,\mu}(\sigma_3)\cdot \widehat{t}_1^{\,\mu^+}(\sigma_4)\right]. \qquad (19)$$

$$\widehat{P}^{\sigma}_{1,3}\cdot\widehat{P}^{\sigma}_{2,4} = \tfrac{1}{4}\left[1 + 4\sum_{\mu=-1}^{1} \widehat{t}_1^{\,\mu}(\sigma_1)\cdot \widehat{t}_1^{\,\mu^+}(\sigma_3)\right]\times$$
$$\times\left[1 + 4\sum_{\mu=-1}^{1} \widehat{t}_1^{\,\mu}(\sigma_2)\cdot \widehat{t}_1^{\,\mu^+}(\sigma_4)\right]. \qquad (20)$$

Свёртка (18') даёт разный результат с (19) и с (20). Для V из (17), свёртка по спинам σ_3 и σ_4 включает всю транспозицию (19). Она инвариантна при вращениях в спиновом пространстве, и ранг ω слагаемых в (18') не изменит. Для W (17) свёртка по σ_3 и σ_4 в РМП-4 (18') затрагивает не все переменные в (20). Произведения тензоров в ней «разрываются», и в слагаемых (18') свёртки с $\widehat{t}_1^{\,\pm 1}(\sigma_3)\cdot\widehat{t}_1^{\,\pm 1}(\sigma_4) \approx \widehat{T}^{(2)\pm 2}_{(1^2)2}$ изменяют, по правилу треугольника для спинов [2, 17], ранги ω спиновых тензоров: с $\omega \geq 2$ до $\omega \pm 2$, а с множителем $R_s^{(4)} \equiv R^{(4)0}_{(1^4)0}$ до 0+2=2, порождая и F. Аналогично, из $Sp_3^{r,\sigma}\left\{\widehat{P}^r_{2,3}\Gamma^{(3)}\right\}$ следует $\Delta\omega \leq 1$.

После применения (3) и НИС (7), (7') для W в (17) получим разложение:

$$\frac{1}{3!}\left\{\binom{n+s-2}{2}L_+ + \frac{(n+s-1)(n-s-3)+2}{4}(K + {}'K') + \right.$$
$$\left. + \frac{3n+s-5}{4}(K' + {}'K) + \binom{n-s-4}{2}L_-\right\} = W(1,2|1',2'); \qquad (21)$$
$$W(1,2|1',2') = W(2,1|2',1').$$

Распределения спинов из зарядовых плотностей

Вектор $\widetilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ коэффициентов разложения плотностей (16) по плотностям из (14), определяемым зарядовыми плотностями $R_s^{(2)}$ и $R_s^{(3)}$ в базисе РМП L_+, K, ${}'K$, K', ${}'K'$ и L_-, – это решение системы:

$$\mathbf{T}\cdot\mathbf{x} = \mathbf{b}, \qquad (22)$$

где $\widetilde{\mathbf{b}} = (b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6)$ – вектор коэффициентов разложения R, D или F (16) в этом же базисе. Столбцы матрицы (22) для $\mathbf{T} = \mathbf{T}_5$, где:

$$\mathbf{T}_5 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & \alpha & -\alpha & -\alpha & \alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & \beta & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & \gamma \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \beta & \gamma & -\frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \gamma & \beta & -\frac{1}{6} \\ \frac{1}{2} & 0 & \gamma & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & \beta \\ 1 & -1 & \delta & -\delta & -\delta & \delta \end{pmatrix}; \qquad (23)$$

$$\alpha = -\frac{n+s-2}{3} = 2\gamma + \frac{1}{3};$$
$$\beta = -\frac{n-s-3}{6}; \quad \gamma = -\frac{n+s-1}{6};$$
$$\delta = -\frac{n-s-4}{3} = 2\beta + \frac{1}{3}; \quad \det(\mathbf{T}_5) = 0,$$

равны векторам разложения плотностей R, R', Q, ${}'Q$, Q', ${}'Q'$ в том же базисе. Из-за (14) её ранг равен 5, и система (22), (23) разрешима, если:

$$b_1 - 2b_2 + 2b_3 + 2b_4 - 2b_5 + b_6 = 0\,. \qquad (24)$$

Её решения – это очевидное $R \equiv R$ и разложение D по R, R', Q, ${}'Q$, Q' и ${}'Q'$:

$$D(1,2|1',2') = \left(x\cdot\frac{2n-2}{3} - \frac{n-2}{s(s+1)}\right)\cdot R +$$
$$+ \left(x\cdot\frac{2n-2}{3} - \frac{1}{s(s+1)}\right)\cdot R' + \qquad (25)$$
$$+ x\cdot(Q + {}'Q + Q') + \left(x - \frac{3}{s(s+1)}\right)\cdot {}'Q',$$

с произвольным $x = x_3 = x_4 = x_5 = \dfrac{3}{s(s+1)} + x_6$, и

ISSN 2411-720X (Print)
ISSN 2413-0834 (Online)

$x_1 = x\cdot\frac{2n-2}{3} - \frac{n-2}{s(s+1)}$, $x_2 = x\cdot\frac{2n-2}{3} - \frac{1}{s(s+1)}$.

При $x = 0$ из (25) следует

$$D = \frac{1}{s(s+1)}\left[(2-n)R - {}'R - 3Sp_3\left\{\widehat{P}_{13}R_s^{(3)}\right\}\right]. \qquad (26)$$

Система (22) с матрицей (23) не совместна для спин-спиновой плотности F.

После замены плотности $'Q'$ на W в системе (22) её неособенная матрица $\mathbf{T} = \mathbf{T}_6$ равна:

$$\det(\mathbf{T}_6) \neq 0;$$

$$\mathbf{T}_6 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & \alpha & -\alpha & -\alpha & \frac{\alpha(3\alpha+1)}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & \beta & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & \frac{18\beta\gamma+1}{12} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \beta & \gamma & -\frac{2\gamma+\beta}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \gamma & \beta & -\frac{2\gamma+\beta}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & \gamma & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & \frac{18\beta\gamma+1}{12} \\ 1 & -1 & \delta & -\delta & -\delta & \frac{\delta(3\delta+1)}{4} \end{pmatrix}. \qquad (27)$$

Значения α, β, γ и δ те же, что в (23). Последний столбец (27) – вектор разложения W по РМП-2 функций Фока. Система (22) с $\mathbf{T=T_6}$ разрешима с любым $\widetilde{\mathbf{b}} = \mathbf{b}^{\mathrm{T}} = (b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6)$, её решениями будут разложения по R, R', Q, $'Q$, Q', W.

Так как для шестого столбца матрицы (27) тождество (24) не выполняется, в решении (22) для спин-орбитальной плотности D отсутствует W, и оно равно (25) с $x = \frac{3}{s(s+1)}$:

$$D = \frac{1}{s(s+1)}\left[n\cdot R + (2n-3)\,{}'R + 3(Q + {}'Q + Q')\right] =$$
$$= \frac{1}{s(s+1)}\left[n\cdot R_s^{(2)} + (2n-3)\,{}'R_s^{(2)}\right] + \qquad (28)$$
$$+ \frac{3}{s(s+1)}Sp_3\left\{\left(1 + \widehat{P}_{12} + \widehat{P}_{13}\right)\cdot \widehat{P}_{23}\cdot R_s^{(3)}\right\}.$$

Вследствие (14) формулы (25), (26) и (28) для плотности D тождественны. Они эквивалентны формуле (8) из [7] и результату из [6], полученному в спин-орбитальном подходе.

С вектором $\widetilde{\mathbf{b}} = \frac{1}{2s(2s-1)}\cdot(2, -1, 1, 1, -1, 2)$,

для F (16), из 2-ой и 5-ой строк системы (22) с $\mathbf{T=T_6}$ получим: $x_3 = 0$, а из 3-го и 4-го уравнений системы: $x_4 = x_5$. Значения x_1, x_2, x_4 и x_6 разные.

$$F = \frac{\binom{2s+3}{2}^{-1}}{s(2s-1)}\left\{\left[s(s+1) - 3(n^2 - 2n - 1)\right]\cdot R + \right.$$
$$+ 2\left[s(s+1) - 3(n-2)^2\right]\cdot R' - \qquad (29)$$
$$\left. - \frac{9}{2}(2n-7)(Q' + {}'Q) + 36W\right\}.$$

Согласно (9") плотность (29) должна быть антисимметричной и в штрихованных, и в нештрихованных переменных. В $-(Q' + {}'Q)/2$ из (29) выделим симметричную и антисимметричную части с помощью тождества (14).

$$-\frac{Q' + {}'Q}{2} = -\frac{Q' + {}'Q}{2} + \frac{0}{4} = \frac{-Q' - {}'Q}{2} +$$
$$+ \frac{Q + {}'Q + Q' + {}'Q' + \frac{N-2}{3}\cdot(R + R')}{4} = \qquad (30)$$
$$= \widehat{A}_{12}\cdot Q\cdot \widehat{A}_{1'2'} + \frac{n-1}{3}\widehat{S}_{12}\cdot R\cdot \widehat{S}_{1'2'} \ ,$$

где $\left(\widehat{S}_{12}\right)^2 = \widehat{S}_{12}$ – симметризатор. Тождественные преобразования для W, с аналогичным (14) равенством, исключают из (29) симметричную составляющую. Иначе, её отсутствие легко проверить, применив в (29) тождество (30) и разложения для R (16) и для W (21). В итоге имеем:

$$F = \frac{3}{s(s+1)(2s-1)(2s+3)}\widehat{A}_{12}\left\{\lambda\cdot R_s^{(2)} + \right.$$
$$\left. + \nu\cdot Sp_3\left(\widehat{P}_{23}^{r}R_s^{(3)}\right) + 12Sp_{3,4}\left(\widehat{P}_{13}^{r}\widehat{P}_{24}^{r}R_s^{(4)}\right)\right\}\widehat{A}_{1'2'}. \qquad (31)$$

В (31) $\lambda = (n-3)^2 - s(s+1)/3 = x_1 - x_2$, где x_1 и x_2 – численные коэффициенты при R и R' в (29), и $\nu = 3(2n-7)$, как в (9) из [7].

ИС, связывающие тензорные пространственные компоненты РМП-1 и РМП-2, даны в [5] на стр. 590 и в формулах (49)-(53) из [3], включающих и переходные по спину плотности.

Формулы, выражающие спиновую, (49) из [3], спин-орбитальную, с формой записи (26), и спин-спиновую, как в (31), плотности через зарядовые плотности, оказались удобными для определения операторов спиновых плотностей в базисе генераторов унитарной группы [7]. Отсутствие там множителей 1/s и 1/(s(2s-1)) связано с различиями в определениях плотностей.

Физический смысл ряда интегральных соотношений

Физический смысл ИС между пространственными тензорными компонентами РМП-p различной частичности часто связан со значением их полной свёртки. Такие свёртки для РМП-2 и РМП-1 следуют непосредственно из [3, 5] и из определений зарядовой и спиновой плотностей через РМП нормированной функции Фока:

$$Sp\{\rho_s\} = N,\ Sp\{d_s\} = 2,\ Sp\left\{R_s^{(2)}\right\} = n(2n-1). \qquad (32)$$

Свёртка выражения (49) из [3] даёт тождество

$$Sp_{1,2}\{R'\} = -n\cdot(n-2) - s\cdot(s+1). \qquad (33)$$

Из формул (50) – (53) в [3] следуют

$$-Sp_{1,2}\{D_s'\} = -Sp_{1,2}\{{}'D_s\} = (2n-1) =$$
$$= Sp_{1,2}\{D_s\} = Sp_{1,2}\{{}'D_s'\},\ \ Sp_{1,2}\{F_s\} = 1. \qquad (34)$$

Климко Г.Т.
Донецкий национальный технический университет

И значение $Sp_{1,2}\{K'\} = n - s$ в [4], и равенство (33) связаны с принадлежностью и функции Фока, и плотности R_s системы состоянию с определённым полным спином. Применив формулу Фока-Дирака [17] для оператора $\hat{S}^2$ и тождество (33) при вычислении его среднего значения, получим подтверждение этого:

$$\langle sM | \hat{S}^2 | sM \rangle = \langle \Phi_s | -n(n-2) - \sum_{i<j} \hat{P}_{ij} | \Phi_s \rangle = = -n(n-2) - Sp_{1,2}\{R'\} = s \cdot (s+1). \quad (35)$$

Транспозиции в формуле Фока-Дирака действуют на пространственные координаты частиц.

Полученные для Q (13) и W (17) разложения (15) и (21) по базису РМП-2 функций Фока дают значения соответствующих свёрток:

$$\begin{aligned} &Sp_{1,2}\{Q\} = \frac{3}{2n-2} Sp_{1,2}\{R'\}, \\ &Sp_{1,2}\{\,'Q\} = Sp_{1,2}\left\{R_s^{(3)}(2,3,1|1,2,3)\right\} = \\ &\quad = \frac{n-1}{3}\left[n \cdot (n-5) + 3s \cdot (s+1)\right], \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} &6Sp_{1,2}\{W\} = 6Sp_{1,2}\left\{R_s^{(4)}(3,4,1,2|1,2,3,4)\right\} = \\ &= s \cdot (s+1)[2n \cdot (n-5) + s \cdot (s+1) + 6] + \\ &+ n \cdot (n-1) \cdot \left(n^2 - 5n + 9\right). \end{aligned} \quad (37)$$

Верные значения свёрток (36), (37), (32) и (33), определяемых зарядовыми плотностями РМП-2 – РМП-4, гарантируют нулевую дисперсию оператора $\hat{S}^2$. Действительно, имеем:

$$\begin{aligned} &\langle sM | \left[\hat{S}^2 - s(s+1)\right]^2 | sM \rangle = \langle \Phi_s | [-n(n-2) - \\ &- \sum_{i<j} \hat{P}_{ij} - s(s+1)]^2 | \Phi_s \rangle = [n(n-2) + s(s+1)]^2 + \\ &\quad + 2[n(n-2) + s(s+1)] Sp_{1,2}\{R'\} + \\ &\quad + 6Sp_{1,2}\{W + \,'Q\} + Sp_{1,2}\{R\} \equiv 0. \end{aligned} \quad (38)$$

Способы построения зарядовых плотностей $R_s^{(2)}$, $R_s^{(3)}$ и $R_s^{(4)}$, отвечающих чистому спиновому состоянию со спином s для $2n$-частичной системы, не влияют на эти результаты.

Заключение

Теоретико-групповые методы построения шредингеровской функции (см. [12, 14]) преобладали в её исследовании, начиная с работ [16]. Способ «конструирования» шредингеровской функции был отделён от исследования её свойств только после открытия трёх условий Фока [1], гарантирующих её принадлежность к состоянию с определённым полным спином.

В работах [18 – 21], развивающих метод Фока, эти условия применялись для построения упрощённых шредингеровских функций, в частности, с отделённым электроном и для проверки условий Фока в определённой её модели.

В работах [3 – 10] метод координатной функции Фока получил дальнейшее развитие. Спиновая плотность до работы [4] в нём не рассматривалась. К изучению зарядовых и спиновых плотностей РПМ-p одного состояния он применён в [4, 5, 7], к переходным по спину РПМ-p – в [3], к нерутановским состояниям молекул и атомов с учётом пространственных симметрий – в [9, 10], к выводу ОИС между РМП функций Фока различной частичности – в [11] и т. д.. Способ его применения для получения ИС между компонентами РМП различного ранга и частичности предложен здесь.

Все преобразования и вычисления проведены с плотностями, зависящими только от пространственных координат, что подтверждает универсальность методов «квантовой механики без спина» [1 – 13, 15] и развивает их.

Все установленные соотношения точные и не зависят от метода построения функции определённого спинового состояния. Они будут применены и в проверках корректности приближений, и как общий метод изучения спиновых свойств N-электронных систем с учётом и их пространственных симметрий.

Список литературы

1. Фок В.А. О волновых функциях многоэлектронных систем // Журн. Эксперим. и теорет. физ. – 1940. – Т. 10, № 9 – 10. – С. 961 – 979.
2. Фок В.А. Начала квантовой механики. – М.: Наука, 1976. – 376 с.
3. Klimko G.T., Mestechkin M.M., Whyman G.E. Fock coordinate function method for separation of spin variables in transition density matrices // Intern. J. Quantum Chem. – 1980. – V. 17, no 3. – pp. 415 – 428.
4. Вайман Г.Е., Лузанов А.В., Местечкин М.М. Отделение спина и метод координатной волновой функции Фока в проблеме N – представимости // Теорет. и матем. физ. – 1976. – Т. 28, № 1. – С. 65 – 79.
5. Mestechkin M.M., Klimko G.T. Spin-dependent operators in the spin-free quantum chemistry // Intern. J. Quantum Chem. – 1978. – V. 13, no 5. – pp. 579 – 596.
6. Luzanov A.V., Whyman G.E. Structure and Spin-Purity Conditions for Reduced Density Matrices of Arbitrary Order // Intern. J. Quantum Chem. – 1981. – V. 20, no 6. – pp. 1179 – 1189.
7. Климко Г.Т., Лузанов А.В. Решение проблемы определения спиновых свойств молекул в унитарном формализме квантовой химии // Журн. структурн. химии. – 1987. – Т. 28, № 5. – С. 3 – 9.
8. Климко Г.Т., Местечкин М.М. Суперпозиция конфигураций и метод координатной функции Фока // Многоэлектронная задача в квантовой химии (Сб. научных трудов). – К.: Наук. думка, 1987. – С. 31 – 43.

9. Klimko G.T., Mestechkin M.M. Roothaan's Open Shell Theory from the Viewpoint of an Orthogonal Group // Intern. J. Quantum Chem. – 1990. – V. 37, no 5. – pp. 753 – 771.
10. Климко Г.Т. О применимости молекулярных методов для расчётов атомов с открытыми оболочками // Журн. физич. химии. – 1996. – Т. 70, № 4. – С. 667 – 674.
11. Климко Г.Т. Метод координатной функции Фока, производящая функция, интегральные соотношения // Системный анализ и информационные технологии в науках о природе и обществе. – 2012, № 1(2) – 2(3). – С. 99 – 106.
12. Каплан И.Г. Симметрия многоэлектронных систем. – М.: Наука, 1969. – 407 с.
13. Matsen F.A., Poshusta R.D. Reduced Density Matrices with Application to Physical and Chemical Problems // Queen's Papers on Pure and Applied Mathematics. – 1968, no 11. – pp. 20 – 30.
14. Вигнер Е. Теория групп и её приложения в квантовомеханической теории атомных спектров. – М.: И.Л., 1961. – 443 с.
15. Klimko G.T. Recovery of Bases of Group π_{2n} Representation on its Sub-group $\pi_{n\times n}$ and Garriman's Theorem // Искусственный интеллект. – 2012. – no 2. – pp. 69 – 76.
16. Hund F. Symmetriecharactere der Termen bei Systemen mit gleichen Partikeln in der Quantenmechanic. – Zeitschrift for Physik (Berlin), 1927, v. 43. – pp. 788 – 804.
17. Дирак П. Принципы квантовой механики. – М.: Наука, 1979. – 480 с.
18. Друкарёв Г.Ф. К теории столкновения электронов с атомами // Журн. эксперим. и теор. физ., 1956, т. 31, № 2. – С. 288 – 301.
19. Абаренков И.В. О шредингеровской координатной функции для произвольного состояния многоэлектронного атома // Вестник ЛГУ, 1956, т. 10, № 2. – С. 43 – 54.
20. Трифонов Е.Д. К вопросу о симметрии многоэлектронной шредингеровской волновой функции // Журн. эксперим. и теор. физ. – 1958, т. 34, № 6. – С. 1643 – 1644.
21. Зельцер Г.И. Условие циклической симметрии Фока и схемы Юнга // Журн. эксперим. и теор. физ. – 1958, т. 35, № 4. – С. 1058 – 1059.

References (transliteration)

1. Fok V.A. O volnovyh funkcijah mnogojelektronnyh sistem [On the wave functions of many-electron systems] // Zhurn. Jeksperim. i teoret. fiz. – 1940. – V. 10, no 9 – 10. – pp. 961 – 979.
2. Fok V.A. Nachala kvantovoj mehaniki [Principles of Quantum Mechanics] – M.: Nauka, 1976. – 376 p.
3. Klimko G.T., Mestechkin M.M. and Whyman G.E. Fock coordinate function method for separation of spin variables in transition density matrices // Intern. J. Quantum Chem. – 1980. – V. 17, no 3. – pp. 415 – 428.
4. Vajman G.E., Luzanov A.V. and Mestechkin M.M. Otdelenie spina i metod koordinatnoj volnovoj funkcii Foka v probleme N – predstavimosti [The Separation of spin and Fock coordinate wave function method in the problem N – representability] // Teoret. i matem. fiz. – 1976. – V. 28, no 1. – pp. 65 – 79.
5. Mestechkin M.M. and Klimko G.T. Spin-depen-dent operators in the spin-free quantum che-mistry // Intern. J. Quantum Chem. – 1978. – V. 13, no 5. – pp. 579 – 596.
6. Luzanov A.V. and Whyman G.E. Structure and Spin-Purity Conditions for Reduced Density Matrices of Arbitrary Order // Intern. J. Quantum Chem. – 1981. – V. 20, no 6. – pp. 1179 – 1189.
7. Klimko G.T. and Luzanov A.V. Reshenie problemy opredelenija spinovyh svojstv molekul v unitarnom formalizme kvantovoj himii [The solution to the problem of determining the spin properties of molecules in the unitary formalism of quantum chemistry] // Zhurn. strukturn. himii. – 1987. – V. 28, no 5. – pp. 3 – 9.
8. Klimko G.T. and Mestechkin M.M. Superpozicija konfiguracij i metod koordinatnoj funkcii Foka [The superposition of the configurations and Fock coordinate function method] / Mnogo-jelektronnaja zadacha v kvantovoj himii (Sb. nauchnyh trudov). – K.: Nauk. dumka, 1987. – pp. 31 – 43.
9. Klimko G.T. and Mestechkin M.M. Roothaan's Open Shell Theory from the Viewpoint of an Orthogonal Group. // Intern. J. Quantum Chem. – 1990. – V. 37, no 5. – pp. 753 – 771.
10. Klimko G.T. O primenimosti molekuljarnyh metodov dlja raschjotov atomov s otkrytymi obolochkami [On the applicability of molecular methods for the calculations of atoms with open shells] // Zhurn. fizich. himii. – 1996. – V. 70, no 4. – pp. 667 – 674.
11. Klimko G.T. Metod koordinatnoj funkcii Foka, proizvodjashhaja funkcija, integral'nye sootnoshenija [The Fock coordinate wave function method, the generate function, the integral relations] // Sistemnyj analiz i informacionnye tehnologii v naukah o prirode i obshhestve. – 2012, no 1(2) – 2(3). – pp. 99 – 106.
12. Kaplan I.G. Simmetrija mnogojelektronnyh sistem [Symmetry of many-electron systems] – M.: Nauka, 1969. – 407 p.
13. Matsen F.A. and Poshusta R.D. Reduced Density Matrices with Application to Physical and Chemical Problems // Queen's Papers on Pure and Applied Mathematics. – 1968, no 11. – pp. 20 – 30.
14. Vigner E. Teorija grupp i ejo prilozhenija v kvantovomehanicheskoj teorii atomnyh spektrov [Group theory and its application to the

quantum mechanics of atomic spectra] – M.: Inostr. lit., 1961. – 443 p.
15. Klimko G.T. Recovery of Bases of Group π_{2n} Representation on its Sub-group $\pi_{n\times n}$ and Garriman's Theorem // Iskusstvennyj intellekt. – 2012. – no 2. – pp. 69 – 76.
16. Hund F. Symmetriecharactere der Termen bei Systemen mit gleichen Partikeln in der Quantenmechanic. – Zeitschrift for Physik (Berlin), 1927, V. 43. – pp. 788 – 804.
17. Dirak P. Principy kvantovoj mehaniki [The principles of quantum mechanics] – M.: Nauka, 1979. – 480 p.
18. Drukarjov G.F. K teorii stolknovenija jelektronov s atomami [To the theory of the collision of electrons with atoms] // Zhurn. Jeksperim. i teor. fiz., 1956, V. 31, no 2. – pp. 288 – 301.
19. Abarenkov I.V. O shredingerovskoj koordinatnoj funkcii dlja proizvol'nogo sostojanija mnogojelektronnogo atoma [On Schrodinger coordinate function for an arbitrary state manyelectron atoms] // Vestnik LGU, 1956, V. 10, no 2. – pp. 43 – 54.
20. Trifonov E.D. K voprosu o simmetrii mnogojelektronnoj shredingerovskoj volnovoj funkcii [On the question of the symmetry of many-electron Schrodinger wave function] // Zhurn. jeksperim. i teor. fiz. – 1958, V. 34, no 6. – pp. 1643 – 1644.
21. Zel'cer G.I. Uslovie ciklicheskoj simmetrii Foka i shemy Junga [The condition of Fock cyclic symmetry and Jung schemes] Zhurn. jeksperim. i teor. fiz. – 1958, V. 35, no 4. – pp. 1058 – 1059.

Климко Г.Т. «Метод просторової функції Фока, інтегральні співвідношення між спіновими і зарядовими густинами, їхні властивості». *Отримане в попередній роботі загальне інтегральне співвідношення між зредукованими матрицями густини (ЗМГ) різної частковості для функцій Фока, що витікає з методу просторової функції Фока, застосовано для встановлення інтегральних співвідношень між спіновими і зарядовими густинами. Ці співвідношення здобуті рішенням систем рівнянь, які було запропоновано й записано у базису ЗМГ для функцій Фока. Попередній результат використано, щоб часткові інтеграли від зарядових густин з транспозиціями розкласти по базису вказаних ЗМГ. Особливість отриманих рішень пов'язана з неоднозначністю форми їхнього запису, тотожність яких доведена. В проведених перетвореннях використано тільки густини, що залежать від просторових координат. Цей підхід додав до методів квантової механіки без спіну нові засоби дослідження спінових розподілів. Згадано і результати попередніх робіт. Обговорено фізичні наслідки від обчислених значень інтегралів для дво-, трьох- і чотирьохчасткових матриць зарядової густини з транспозиціями, діючими на них з одного боку. Всі отримані результати точні. Тому доречно їх застосовувати і для перевірки припустимості наближень, використаних у побудові матриць зарядової густини, і для тестування відповідності модельної функції чистому спіновому стану.*

Ключові слова: квантова механіка без спіну, зарядові та спинові густини, інтегральні співвідношення.

Klimko G.T. "The Fock coordinate wave function method, the integral relations between spin and charge densities, its properties". *The practical consequence of the Fock coordinate wave function method in form of the general integral relation between Fock functions reduced density matrices (RDM) with different number of particles has been obtained in the preceding article. This result was applied here for determining the integral relationships between spin and charge densities. These relations are obtained by solving systems of equations that have been proposed and ones have been written at Fock functions RDM basis. And also the special cases of the general integral relation of the previous article have been considered. The last cases were used to obtain the expansions on the basis of the RDM of Fock functions for the partial integrals of the charge densities having the transpositions of their coordinates. This is not as straightforward as it may seem, since the multiple character of integral relations are existing. But applied method allows obtaining the different forms of such relations in the strict sense. Moreover the identity of ambiguity forms of writing has been proved. In the conducted transformations used only densities that depend on spatial coordinates of electrons. Therefore this approach added to the methods of spin free quantum mechanics new attack on the problem of spin distributions. The results of preceding articles have been touched. The full integral value for the two-, three- and four-particle charge densities having transpositions, which act on them on one side, were calculated, and its physical sense have been discussed also. The all received results do not depend on the used approached model for calculations of quantum mechanical system state, because ones are exact. Hence all such results can be applied to check of the fidelity of construction both the appropriate charge densities and the approached model wave function, which used.*

Keywords: spin free quantum mechanics, charge and spin densities, integral relations.

Статья поступила в редакцию 27.06.2014
Рекомендована к публикации канд. техн. наук В.Н. Беловодским