

ПРОИСХОЖДЕНИЕ ГРАДИЕНТНЫХ ПОПРАВОК К ПРИБЛИЖЕНИЮ ТОМАСА — ФЕРМИ: МЕТОД КИРЖНИЦА

Е.А. Семенова

Katersemenovaa@yandex.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

В статье представлен метод Киржница для вычисления квантовых поправок к приближению Томаса — Ферми в многофермионных системах. Метод основан на операторном подходе с использованием матрицы плотности и не требует теории возмущений, что обеспечивает его применимость в условиях сильной нелинейности. Ключевым аспектом является учет некоммутативности операторов импульса $\hat{p}$ и потенциала $\hat{V}$ через приведение матрицы плотности к нормальной форме. Получены явные выражения для поправки четвертого порядка к электронной плотности ($\delta_4 n$) и полной энергии ($\delta_4 \langle \hat{H} \rangle - \mu N$). На основе этих результатов выведена градиентная поправка четвертого порядка для функционала кинетической энергии $T_4[n]$. Метод универсален для локальных и самосогласованных потенциалов, включая обменно-корреляционные эффекты, и перспективен для расчетов по методу функционала плотности и наноэлектроники, включая моделирование энергии наноструктур.

Ключевые слова: метод Киржница, квантовые поправки, матрица плотности, градиентное разложение, функционал кинетической энергии, некоммутативность операторов, нормальная форма, поправка четвертого порядка, электронная плотность

Введение. Приближение Томаса — Ферми остается фундаментальным инструментом для описания многоэлектронных систем, однако его точность ограничена пренебрежением квантовыми эффектами, особенно в областях сильной неоднородности электронной плотности. Традиционные методы вычисления квантовых поправок, такие как теория возмущений, неприменимы в условиях существенной нелинейности системы. Актуальность данной статьи обусловлена необходимостью повышении точности описания неоднородных ферми-систем. Для преодоления ограничений теории возмущений рассматривается применение метода Киржница [1]. Этот подход, при котором используется операторное представление матрицы плотности, учитывает некоммутативность операторов импульса $\hat{p}$ и потенциала $\hat{V}$ с помощью процедуры приведения к нормальной форме. Целью работы является применение метода Киржница для строгого вывода квантовых поправок четвертого порядка к приближению Томаса — Ферми в многофермионных системах, что особенно важно для современных задач метода функционала плотности и наноэлектроники.

Суть метода Киржница. В методе Киржница [1] квантовые поправки к приближению Томаса — Ферми [2, 3] возникают естественным образом из-за некоммутативности операторов импульса $\hat{p}$ и потенциала $\hat{V}$.

Матрица плотности в операторной форме выражается в виде

$$\hat{\rho} = f(\hat{H}),$$

где f — распределение Ферми — Дирака, которое описывается следующим образом:

$$f(\hat{H}) = \left[1 + \exp \left(\frac{\hat{H} - \mu}{k_B T} \right) \right]^{-1},$$

где μ — химический потенциал; k_B — постоянная Больцмана; T — температура; $\hat{H}$ — гамильтониан фермиона в локальном потенциале V :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \hat{V}.$$

Вместо того чтобы напрямую использовать разложение Тейлора для приведения к нормальной форме, можно представить функцию Ферми в виде интеграла Фурье [4]:

$$f(\hat{H}) = \int c(\tau) e^{i\tau \hat{H}} d\tau, \quad (1)$$

где $c(\tau)$ — спектральная весовая функция; τ — вспомогательная переменная интегрирования.

Экспоненту $e^{i\tau \hat{H}}$ необходимо привести к нормальной форме:

$$e^{i\tau \hat{H}} = e^{i\tau \hat{V}} \hat{K} e^{i\tau \frac{\hat{p}^2}{2}}. \quad (2)$$

Оператор $\hat{K}$ можно определить следующим образом:

$$\hat{K} = e^{-i\tau \hat{V}} e^{i\tau \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \hat{V} \right)} e^{-i\tau \frac{\hat{p}^2}{2}}. \quad (3)$$

Обозначим $i\tau$ как λ и продифференцируем оператор $\hat{K}$. Заменяя все операторы их классическими аналогами [5], уравнение (3) записываем в следующем виде:

$$\frac{\partial \hat{K}}{\partial \lambda} = \left((i\mathbf{p} \cdot \nabla - \Delta/2) + \lambda (i\nabla V \cdot \mathbf{p} - \nabla V \cdot \nabla - \Delta V/2) - \frac{\lambda^2}{2} (\nabla V)^2 \right) \hat{K}. \quad (4)$$

Подставляя $\hat{K} = 1$ в выражение (2) и используя (1), получаем классическое распределение Томаса — Ферми в фазовом пространстве:

$$\rho_{TF} = f(E) = \left[1 + e^{\frac{E-\mu}{kT}} \right]^{-1}, \quad (5)$$

где E — классический аналог $\hat{H}$. Итерация уравнения (7) дает квантовые поправки к распределению Томаса — Ферми (5).

Вывод четвертой поправки градиентного разложения. Уравнение (4) можно переписать в следующем виде [6]:

$$\frac{\partial K}{\partial \lambda} = (O_1 + O_2)K,$$

где O_1 — оператор первого порядка по ∇ : $O_1 = ip \cdot (\nabla + \lambda \nabla V)$, а O_2 — оператор второго порядка по ∇ : $O_2 = -\left[\frac{\Delta}{2} + \lambda \left(\frac{\Delta V}{2} + \nabla V \cdot \nabla \right) + \frac{\lambda^2}{2} (\nabla V)^2 \right]$.

Член второго порядка задается выражением

$$\delta_2 K = \int O_2 + \int O_1 \int O_1.$$

Член четвертого порядка

$$\delta_4 K = \int O_2 \int O_2 + \int O_2 \int O_1 \int O_1 + \int O_1 \int O_2 \int O_1 + \int O_1 \int O_1 \int O_2 + \int O_1 \int O_1 \int O_1 \int O_1.$$

Электронная плотность $n(r)$ вычисляется следующим образом [7]:

$$n(r) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \rho(r, p) d^3 p.$$

Поправка четвертого порядка $\delta_4 n$ определяется в виде

$$\begin{aligned} \delta_4 n = & \frac{1}{\pi^2} \left(k_F^{-3} \frac{\Delta^2 V}{240} + k_F^{-5} \left(\frac{(\Delta V)^2}{96} + \frac{(\nabla \nabla V)^2}{120} + \frac{\nabla V \cdot \nabla \Delta V}{40} \right) + \right. \\ & \left. + k_F^{-7} \left(\frac{5}{96} (\nabla V)^2 \Delta V + \frac{\nabla V \cdot \nabla (\nabla V)^2}{32} \right) + k_F^{-9} \frac{35}{384} (\nabla V)^4, \right. \end{aligned}$$

где k_F — локальный импульс Томаса — Ферми [8], $k_F^2 = 2 |\mu - V(r)|$.

Для расчета изменения полной энергии квантовые поправки к полной свободной энергии, которые определяются аналогично $n(r)$. Поправка четвертого порядка имеет вид

$$\delta_4 \langle H \rangle - \mu N = \frac{1}{\pi^2} \int \left[\frac{k_F^{-3} (\Delta V)^2}{480} + \frac{k_F^{-5} (\nabla V)^2 \Delta V}{240} + \frac{k_F^{-7} (\nabla V)^4}{384} \right] d^3 r, \quad (6)$$

где N — количество фермионов в системе; r — пространственная координата точки в трехмерном пространстве.

Полная кинетическая энергия $T[n]$ может быть записана следующим образом [9]:

$$T[n] = T_0[n] + T_2[n] + T_4[n]. \quad (7)$$

Плотность n можно представить в виде

$$n = n_0 + \delta n, \quad (8)$$

где n_0 — плотность Томаса — Ферми, $n_0 = \frac{1}{3\pi^2} (2[\mu - V(r)])^{3/2}$.

Учтем, что

$$\left. \frac{\delta T_0[n]}{\delta n(r)} \right|_{n=n_0} = \mu - V(r). \quad (9)$$

Подставляя (8) в (7), разлагая по степеням δn и принимая во внимание (9), получаем соотношение для вклада четвертого порядка:

$$T_4[n_0] = \delta_4 (\langle \hat{H} \rangle - \mu N) - \frac{1}{2} \int \frac{\partial^2 T_0}{\partial n^2} \Big|_{n=n_0} (\delta_2 n)^2 d^3 r - \int \frac{\partial T_2}{\partial n} \Big|_{n=n_0} \delta_2 n d^3 r.$$

Подстановка (6) и выражения для $\delta_4 n$ из работы Киржница [1] позволяет определить $T_4[n]$ [10]. Окончательный вид четвертой поправки градиентного разложения функционала кинетической энергии:

$$T_4[n] = \left(\frac{3\pi^2}{540} \right)^{2/3} \int n^{1/3} \left[\left(\frac{\Delta n}{n} \right)^2 - \frac{9}{8} \left(\frac{\Delta n}{n} \right) \left(\frac{\nabla n}{n} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\nabla n}{n} \right)^4 \right] d^3 r.$$

Заключение. В работе продемонстрирован метод Киржница для вычисления квантовых поправок к приближению Томаса — Ферми, основанный на операторном представлении матрицы плотности. Преимущество такого подхода заключается в учете некоммутативности операторов импульса и потенциала без привлечения теории возмущений, что особенно важно для систем с сильной неоднородностью. Получены явные выражения для поправок четвертого порядка к электронной плотности и энергии, также определена градиентная поправка функционала кинетической энергии $T_4[n]$. Метод универ-

сален для локальных и самосогласованных потенциалов, включая обменно-корреляционные эффекты, и перспективен для расчетов в рамках метода функционала плотности и наноэлектроники, в том числе при моделировании энергии наноструктур [11]. Полученные результаты демонстрируют хорошую согласованность с современными исследованиями сходимости градиентных разложений для кинетической энергии [12] и открывают возможности для улучшения расчетов в орбитально-свободном методе функционала плотности, включая моделирование динамики сложных систем [13].

Литература

- [1] Киржниц Д.А. Квантовые поправки к статистическому методу Томаса — Ферми. *ЖЭТФ*, 1957, т. 5, с. 64.
- [2] Thomas L.H. The calculation of atomic fields. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 1927, vol. 23, pp. 542–548.
- [3] Fermi E. Un metodo statistico per la determinazione di alcune priorieta dell'atome. *Rend. Accad. Naz. Lincei*, 1927, vol. 6, pp. 602–607.
- [4] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. Москва, Физматлит, 1962, 446 с.
- [5] Hodges C.H. Quantum Corrections to the Thomas — Fermi Approximation — the Kirzhnits Method. *Canadian Journal of Physics*, 1973, vol. 51, no. 12, pp. 1428–1437.
- [6] Murphy D.R. Sixth-order term of the gradient expansion of the kinetic-energy density functional. *Physical Review A*, 1981, vol. 24, no. 3, pp. 1682–1684. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.24.1682>
- [7] March N.H. *Electron Density Theory of Atoms and Molecules*. London, Academic Press, 1992, 258 p.
- [8] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния*. Москва, Наука, 1978, 448 с. (Теоретическая физика, т. IX).
- [9] Сатанин А.М. *Введение в теорию функционала плотности*. Нижний Новгород, Изд-во Нижегород. ун-та, 2009, 64 с.
- [10] Tran F., Wesolowski T.A. Semilocal kinetic energy functionals for orbital-free density functional theory. *Journal of Chemical Physics*, 2019, vol. 151.
- [11] Еркович О.С., Федорова В.Ю. Расчет удельной энергии сферически симметричных наночастиц алюминия в методе функционалов плотности. *Нанотехнологии: разработка, применение — XXI век*, 2020, т. 12, № 2, с. 25–31.
- [12] Еркович О.С., Теребиж А.А. Исследование сходимости градиентного разложения для кинетической энергии на примере электронного газа: двумерный случай. *Необратимые процессы в природе и технике. XI Междунар.*

науч.-техн. конф.: сб. тр. Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2021, т. 1, с. 127–130.

- [13] Jiang K., Shao X., Pavanello M. Efficient time-dependent orbital-free density functional theory: Semilocal adiabatic response. *Phys. Rev. B*, 2022, vol. 106, art. no. 115153. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.115153>

Поступила в редакцию 06.08.2025

Семенова Екатерина Андреевна — студентка кафедры «Физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Научный руководитель — Еркович О.С., кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Семенова Е.А. Происхождение градиентных поправок к приближению Томаса — Ферми: метод Киржница. *Политехнический молодежный журнал*, 2026, № 02 (103). URL: <https://ptsj.bmstu.ru/catalog/phys/tec/1099.html>

ORIGIN OF GRADIENT CORRECTIONS TO THE THOMAS — FERMI APPROXIMATION: THE KIRZHNITS METHOD

E.A. Semenova

Katersemenovaa@yandex.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

The article presents the Kirzhnits method for calculating quantum corrections to the Thomas — Fermi approximation in many-fermion systems. The method is based on an operator approach employing the density matrix and does not rely on perturbation theory, which ensures its applicability in the strongly nonlinear regime. A key aspect is the treatment of the non-commutativity between the momentum operator $\hat{p}$ and the potential $\hat{V}$ by reducing the density matrix to normal form. Explicit expressions are derived for the fourth-order correction to the electron density ($\delta_4 n$) and to the total energy ($\delta_4 \langle \hat{H} \rangle - \mu N$). Based on these results, a fourth-order gradient correction for the kinetic energy functional $T_4[n]$ is obtained. The method is universal for both local and self-consistent potentials, including exchange-correlation effects, and is promising for density functional theory calculations and applications in nanoelectronics, particularly for modeling the energy of nanostructures.

Keywords: Kirzhnits method, quantum corrections, density matrix, gradient expansion, kinetic energy functional, operator non-commutativity, normal form, fourth-order correction, electron density

Received 06.08.2025

Semenova E.A. — Student of Department of Thermal Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Scientific advisor — Erkovich O.S., associated professor of Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Please cite this article in English as:

Semenova E.A. Origin of gradient corrections to the Thomas — Fermi approximation: the Kirzhnits method. *Politekhnicheskiy molodezhnyy zhurnal*, 2026, no. 02 (103). URL: <https://ptsj.bmstu.ru/catalog/phys/tec/1099.html>