Scientific journal
PHYSICAL AND MATHEMATICAL EDUCATION
Has been issued since 2013.
Науковий журнал
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНА ОСВІТА
Видається з 2013.

p-ISSN 2413-1571
e-ISSN 2413-158X
DOI: 10.31110/2413-1571
https://fmo-journal.org/

DOI 10.31110/2413-1571-2023-038-2-001 УДК 538.9

МЕТОД ЗНАХОДЖЕННЯ ХВИЛЬОВОЇ ФУНКЦІЇ СИСТЕМИ ЧАСТИНОК

Костянтин АВДОНІН ✉
Військовий інститут телекомунікацій і інформатизації імені Героїв Крут, Україна
avdonink13@gmail.com
https://orcid.org/0000-0001-6805-0870

АНОТАЦІЯ

У даній роботі проводиться аналіз інтегральних рівнянь, відповідних хвильовій функції системи частинок у зв'язаному стані. Показана еквівалентність, отриманих раніше, інтегральних рівнянь типу Фредгольма і Вольтерра. Доведено, що однорідні інтегральні рівняння для хвильової функції системи взаємодіючих частинок у зв'язаному стані, мають тільки тривіальні розв'язки. Для ітерації інтегральних рівнянь і знаходження енергетичного спектру запропонована сферично симетрична форма вільних доданків, яка враховує симетрію хвильової функції.

Формулювання проблеми. *З'ясування можливості та створення методів застосування інтегральних рівнянь, відповідних рівнянню Шредінгера для системи частинок, до знаходження хвильових функцій системи квантових частинок.*

Матеріали і методи. *Застосування перетворення Фур'є при дослідженні багатовимірних інтегральних рівнянь та використання теорем Фредгольма з загальної теорії інтегральних рівнянь.*

Результати. *Проведений аналіз інтегральних рівнянь відповідних хвильовій функції зв'язаного стану системи частинок, показана коректність шляху їх отримання. За альтернативою Фредгольма доведено, що фізичний зміст мають тільки хвильові функції, відповідні неоднорідним рівнянням. Для знаходження хвильової функції з інтегральних рівнянь шляхом ітерації запропонована сферично симетрична форма вільних доданків, яка неявним чином враховує спін частинок системи.*

Висновки. *Запропонований метод знаходження хвильової функції системи частинок є перспективним, оскільки Ітераційні ряди для багатьох типів потенціальної енергії взаємодії будуть збіжними, внаслідок того, що запропоноване інтегральне рівняння відноситься до рівнянь типу Вольтерра. Слід зауважити, що запропонована форма вільних доданків не є єдино можливою формою. При моделюванні систем частинок різного типу вільні доданки повинні відображати характерні риси системи.*

КЛЮЧОВІ СЛОВА: система квантових частинок; стаціонарність; стан; хвильова функція; ітерація.

METHOD OF FINDING THE WAVE FUNCTION OF A SYSTEM OF PARTICLES

Konstantin AVDONIN ✉
Military institute of telecommunications and informatization named after Heroes of Krut, Ukraine
avdonink13@gmail.com
https://orcid.org/0000-0001-6805-0870

ABSTRACT

This paper analyzes the integral equations corresponding to the wave function of a system of particles in a bound state. The equivalence of previously obtained integral equations of the Fredholm and Volterra type is shown. It is proved that homogeneous integral equations for the wave function of a system of interacting particles in a bound state have only trivial solutions. For the iteration of integral equations and finding the energy spectrum, a spherically symmetric form of free terms is proposed, which takes into account the symmetry of the wave function.

Formulation of the problem. *Clarifying the possibility and creating methods of applying integral equations corresponding to the Schrödinger equation for a system of particles to finding the wave functions of a system of quantum particles.*

Materials and methods. *Application of the Fourier transform in the study of multidimensional integral equations and the use of Fredholm's theorems in the general theory of integral equations.*

Results. *The analysis of the integral equations corresponding to the wave function of the bound state of the system of particles was carried out, and the correctness of the way of their obtaining was shown. According to Fredholm's alternative, it is proved that only wave functions corresponding to inhomogeneous equations have a physical meaning. To find the wave function from integral equations by iteration, a spherically symmetric form of free terms is proposed, which implicitly takes into account the spin of the system particles.*

Conclusions. *The proposed method of finding the wave function of the particle system is promising since the iteration series for many types of interaction potential energy will converge, due to the fact that the proposed integral equation refers to Volterra-type equations. It should be noted that the proposed form of free terms is not the only possible form. When modeling particle systems of various types, free terms must reflect the characteristic features of the system.*

KEYWORDS: system of quantum particles; stationarity; state; wave function; iteration.

ВСТУП

Постановка проблеми. На сьогоднішній день наноструктуровані матеріали є об'єктом зростаючого інтересу для фундаментальної та прикладної науки. У зв'язку з цим, особливої актуальності набувають теоретичні методи аналізу квантових систем з багатьох частинок.

Аналіз актуальних досліджень. Наприклад, у роботі (Полуектов, 2015) пропонується термодинамічна теорія збурень для багаточастинкової системи класичних частинок, в якій модель самоузгодженого поля використовується як основне наближення. У роботах (Rakov, 2016; Weyrauch, 2013) створений ефективний та стабільний алгоритм для опису симетричних матричних добуткових станів з періодичними граничними умовами. У роботі (Olemskoi et al., 2013) спираючись на методи квантової теорії поля розроблена статистична теорія складних систем з неадитивними потенціалами. У роботі (Ющенко & Бадалян, 2013) для опису поведінки не екстенсивних систем застосовується деформований гамільтоніан Ізінга. Але, у фундаментальних та прикладних дослідженнях процесів, що відбуваються у фізичних системах, інтегральні рівняння, відповідні хвильовій функції системи частинок є потужним, дійовим засобом

Для цитування:	Авдонін К. Метод знаходження хвильової функції системи частинок. *Фізико-математична освіта*, 2023. Том 38. № 2. С. 7-10. DOI: 10.31110/2413-1571-2023-038-2-001
	Авдонін К. (2023). Метод знаходження хвильової функції системи частинок. *Фізико-математична освіта*, 38(2), 7-10. https://doi.org/10.31110/2413-1571-2023-038-2-001
For citation:	Avdonin, K. (2023). Method of finding the wave function of a system of particles. *Physical and Mathematical Education*, 38(2), 7-10. https://doi.org/10.31110/2413-1571-2023-038-2-001
	Avdonin, K. (2023). Metod znakhodzhennia khvylovoi funktsii systemy chastynok [Method of finding the wave function of a system of particles]. *Fizyko-matematychna osvita – Physical and Mathematical Education*, 38(2), 7-10. https://doi.org/10.31110/2413-1571-2023-038-2-001

✉ Corresponding author

отримання результатів. В роботі (Avdonin & Kovalchuk, 2019) для хвильової функції, відповідної зв'язаному стану системи частинок, отримане ядро інтегрального рівняння типу Фредгольма, яке у випадку однієї частинки збігається з відомим ядром одночастинкової функції. Окрім цього для хвильової функції зв'язаних станів системи частинок, за допомогою розробленого метода обернення диференціальних операторів, побудоване рівняння типу Вольтерра, яке в граничному випадку збігається з відомим одновимірним рівнянням.

Мета статті. Побудовані у роботі (Avdonin & Kovalchuk, 2019) інтегральні рівняння мають вигляд:

$$\varphi_N(\vec{z}) = \varphi_{0N}(\vec{z}) + \int\limits_{(-\infty)}^{(+\infty)} G_N(\vec{z}-\vec{\xi})u\varphi(\vec{\xi})d\vec{\xi} \;; \tag{1}$$

$$\varphi_N(\vec{z}) = \varphi_{0N}(\vec{z}) + \int\limits_{(z_j)}^{(+\infty)} \int\limits_{(-\infty)}^{(\eta_j)} g_N(\vec{\chi})u\varphi(\vec{\xi})d\vec{\xi}d\vec{\eta} \,. \tag{2}$$

де N – кількість частинок у системі, z_j – зважені координати частинок, які дорівнюють добутку координати частинки x_j на корінь квадратний з маси відповідної частинки:

$$z_j = x_j\sqrt{\mu_j} \;; \tag{3}$$

$$\vec{\chi} = 2\vec{\eta} - \vec{z} - \vec{\xi} \,, \tag{4}$$

інтегральні представлення функцій G_N та g_N мають вигляд:

$$G_N = -\frac{1}{2^{3N-1}\pi^{\frac{3N}{2}}} \int\limits_{x_1}^{+\infty} \lambda^{3(N-1)} \exp\left\{-\frac{R^2\lambda^2}{4} - \frac{k^2}{\lambda^2}\right\} d\lambda \,; \tag{5}$$

$$g_N = -\frac{1}{2^{3N-1}\pi^{\frac{3N}{2}}} \int\limits_{x_1}^{+\infty} \lambda^{9N-3} \prod_{j=1}^{3N}(\chi_j) \exp\left\{-\frac{\chi^2\lambda^2}{4} - \frac{k^2}{\lambda^2}\right\} d\lambda \,, \tag{6}$$

$u = {2W_P}/{\hbar^2}$; $k = {\sqrt{2(-E)}}/{\hbar}$; E, W_P – енергія та потенціальна енергія системи частинок; $R = \left|\vec{z} - \vec{\xi}\right|$.

Метою роботи є дослідження властивостей інтегральних рівнянь (1); (2), встановлення зв'язку між ними та з'ясування можливості одержання за їх допомогою хвильової функції багаточастинкової системи.

МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

При встановленні зв'язку між багатовимірними інтегральними рівняннями застосовувався метод перетворень Фур'є, при дослідженні можливості ітерації інтегральних рівнянь використовувались теореми Фредгольма з загальної теорії інтегральних рівнянь.

РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Проведений аналіз інтегральних рівнянь (1); (2), відповідних хвильовій функції зв'язаного стану системи частинок, показав їх еквівалентність, що свідчить про коректність шляху їх отримання, оскільки рівняння були отримані різними засобами.

Якщо у рівнянні (1) перейти від зважених координат до звичайних координат, то інтегральне представлення функції Гріна (5), при значенні хвильового числа рівному *k* буде таким:

$$G_{N,k}(\vec{x},\vec{\xi}) = -\frac{p}{2^{3N-1}\pi^{\frac{3N}{2}}} \int\limits_{x_1}^{+\infty} \lambda^{3(N-1)} \exp\left\{-\frac{q^2(\vec{x},\vec{\xi})\lambda^2}{4} - \frac{k^2}{\lambda^2}\right\} d\lambda \,, \tag{7}$$

де $p = \prod\limits_{j=1}^{3N}\sqrt{\mu_j}$; $q(\vec{x},\vec{\xi}) = \sqrt{\sum\limits_{j=1}^{3N}\mu_j(x_j-\xi_j)^2}$.

Для функцій Гріна (7), знайдена згортка. Якщо позначити згортку через S_{N,k_1,k_2} :

$$S_{N,k_1,k_2} = \int\limits_{(-\infty)}^{(+\infty)} G_{N,k_1}(\vec{x}-\vec{\xi}_1)G_{N,k_2}(\vec{x}-\vec{\xi}_2)d\vec{x} \,, \tag{8}$$

то отриманий результат має вигляд:

якщо $k_1 \neq k_2$, то:

$$S_{N,k_1,k_2} = \frac{G_{N,k_2}(\vec{\xi}_2,\vec{\xi}_1) - G_{N,k_1}(\vec{\xi}_2,\vec{\xi}_1)}{k_1^2 - k_2^2} \,, \tag{9}$$

якщо $k_1 = k_2 = k$, то:

$$S_{N,k,k} = \frac{2}{k}\frac{dG_{N,k}(\vec{\xi}_2,\vec{\xi}_1)}{dk} \,. \tag{10}$$

Використовуючи отримані вирази для згортки (9); (10) доведено, що для хвильових функцій, відповідних однорідному рівнянню (1), виконується тільки умова ортогональності, умова нормування не може бути виконана. Звідки випливає, що фізично змістовні розв'язки однорідного інтегрального рівняння (1) тільки тривіальні.

Для неоднорідного інтегрального рівняння (1), з точністю до постійного, нормувального множника, пропонується вільний доданок у вигляді добутку двох функцій, які враховують симетрію хвильової функції системи частинок, функція Φ_{N_Φ} відповідає ферміонам, функція Φ_{N_B} відповідає бозонам:

$$\varphi_{0N} = \Phi_{N_\Phi}\Phi_{N_B}\,; \tag{11}$$

$$\Phi_{N_\Phi} = \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{x}_1) & \psi_1(\vec{x}_2) & \dots & \psi_1(\vec{x}_N) \\ \psi_2(\vec{x}_1) & \psi_2(\vec{x}_2) & \dots & \psi_2(\vec{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(\vec{x}_1) & \psi_N(\vec{x}_2) & \dots & \psi_N(\vec{x}_N) \end{vmatrix}; \tag{12}$$

$$\Phi_{N_B} = \sum_{i\neq j}\hat{P}_{ij}\psi_1(\vec{x}_1)\psi_2(\vec{x}_2)\dots\psi_N(\vec{x}_N)\,; \tag{13}$$

$\hat{P}_{ij}$ – оператор перестановки векторів $\vec{x}_i$ і $\vec{x}_j$, сумування ведеться по всіх можливих перестановках; ψ_j це функція, відповідна одній частинці, яку в сферичній системі координат можна записати у вигляді:

$$\psi_j = \exp(im\theta_j)\sin^{m_j}\vartheta_j\left(\frac{d}{d(\cos\vartheta_j)}\right)^{m_j} P_{l_j}(\cos\vartheta_j)\,r_j^{l_j}\left(\frac{1}{r_j}\frac{d}{dr_j}\right)^{l_j+1}\exp\{-k_j r_j\}\,; \tag{14}$$

P_{l_j} – поліноми Лежандра; $k_j = \sqrt{2(-E_j)}\big/\hbar$; $\sum_{j=1}^{N}k_j^2 = k^2$; $r_j = \sqrt{\mu_j\sum_{n=1}^{3}x_{jn}^2}$; $l_j = 0, 1, 2, \dots$;

m_j – ціле число, верхня і нижня межа для якого становить $\pm l_j$.

Хвильова функція ψ_j є розв'язком тривимірного рівняння Шредінгера для однієї частинки, яка знаходиться у сферично-симетричному однорідному полі і має від'ємне значення енергії.

В якості вільного доданку інтегрального рівняння (1), який є нульовим наближенням для хвильової функції системи взаємодіючих частинок, пропонується хвильова функція системи не взаємодіючих частинок у сферично-симетричному однорідному полі, яку можна представити у вигляді лінійної комбінації добутків хвильових функцій ψ_j всіх частинок системи. Сума енергій частинок у нульовому наближенні повинна дорівнювати енергії системи взаємодіючих частинок. Пошук дозволених значень енергії системи взаємодіючих частинок можна здійснювати за допомогою умов ортогональності і нормування хвильових функцій системи частинок.

ВИСНОВКИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ПОДАЛЬШОГО ДОСЛІДЖЕННЯ

Проведений аналіз інтегральних рівнянь (1); (2), відповідних хвильовій функції зв'язаного стану системи частинок, показав по перше: їх еквівалентність рівнянь, по друге: за альтернативою Фредгольма показано, що фізичний зміст мають тільки хвильові функції, відповідні неоднорідним інтегральним рівнянням.

Для знаходження хвильової функції з інтегральних рівнянь шляхом ітерації запропонована сферично симетрична форма вільних доданків (11), яка враховує спін частинок системи.

Результати, отримані в даній статті, відкривають нові можливості для моделювання, знаходження хвильової функції та визначення енергетичного спектру системи частинок. Ітераційні ряди, утворені за інтегральними рівняннями, для багатьох типів потенціальної енергії взаємодії будуть збіжними, оскільки інтегральне рівняння (2) відноситься до рівнянь типу Вольтерра. Слід зауважити, що запропонована форма вільних доданків не є єдино можливою формою. При моделюванні систем частинок різного типу вільні доданки повинні відображати характерні риси системи.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Avdonin, K.V., & Kovalchuk, O.V. (2019). Integral equations for the wave function of particle systems. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 22(3), 319-322.
2. Olemskoi, A. I., Yushchenko, O. V., & Badalyan, A. Yu. (2013). Statistical field theory of a non-additive system motion. *Theoretical and Mathematical Physics*, 174(3), 386–405.
3. Rakov, M. V., Weyrauch, M., & Braiorr-Orrs, B. (2016). Symmetries and entanglement in the one-dimensional spin-1/2 XXZ model. *Phys. Rev. B.,* 93(5), 054417.
4. Weyrauch, M., & Rakov, M. V. (2013). Efficient MPS algorithm for periodic boundary conditions and applications. *Ukr. J. Phys.,* 58(7), 657–665.
5. Полуектов Ю.М. (2015). Термодинамічна теорія збурень для класичних систем в наближенні самоузгодженого поля. *Український фізичний журнал*, 60(6), 556–563.
6. Ющенко, О. В., & Бадалян, А. Ю. (2013). Мікроскопічний опис не екстенсивних систем у рамках моделі Ізінга. *Український фізичний журнал*, 58(5), 497–504.

REFERENCES (TRANSLATED AND TRANSLITERATED)

1. Avdonin, K.V., & Kovalchuk, O.V. (2019). Integral equations for the wave function of particle systems. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 22(3), 319-322.
2. Olemskoi, A. I., Yushchenko, O. V., & Badalyan, A. Yu. (2013). Statistical field theory of a non-additive system motion. *Theoretical and Mathematical Physics*, 174(3), 386–405.

3. Rakov, M. V., Weyrauch, M., & Braiorr-Orrs, B. (2016). Symmetries and entanglement in the one-dimensional spin-1/2 XXZ model. *Phys. Rev. B.,* 93(5), 054417.
4. Weyrauch, M., & Rakov, M. V. (2013). Efficient MPS algorithm for periodic boundary conditions and applications. *Ukr. J. Phys.,* 58(7), 657–665.
5. Poluektov, Yu.M. (2015). Termodynamichna teoriia zburen dlia klasychnykh system v nablyzhenni samouzghodzhenoho polia [Thermodynamic perturbation theory for classical systems in the approximation of a self-consistent field]. *Ukrainskyi fizychnyi zhurnal – Ukrainian Journal of Physics*, 60(6), 556–563. (in Ukrainian).
6. Yushchenko, O. V., & Badalyan, A. Yu. (2013). Mikroskopichnyi opys ne ekstensyvnykh system u ramkakh modeli Izinha [Microscopic description of non-extensive systems within the Ising model]. *Ukrainskyi fizychnyi zhurnal – Ukrainian Journal of Physics*, 58(5), 497–504. (in Ukrainian).