김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

일반화된 하트리-포크방정식풀이에서 자체모순없는 마당방법적용

김영성, 김태성, 오수일

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《모든 과학자, 기술자들이 과학기술발전의 추세에 맞게 첨단과학과 기초과학발전에 힘을 넣어 나라의 과학기술을 세계적수준에 올려세우도록 하여야 합니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제20권 62페지)

일반화된 하트리-포크방정식[1]은 련립비선형미적분방정식으로서 보통의 계산수학적 방법을 적용하여서는 풀기 어렵다. 전체 파동함수를 개별립자들의 자리표의 파동함수들로 변수분리하는 한립자근사를 도입하여 량자다체문제를 취급하기 위한 하트리방정식이 제기된 후 한립자근사에서 립자계의 교환상관을 고려하여 립자계의 전체 파동함수를 슬레이터행렬식형태로 놓고 근사를 진행한 하트리-포크방정식으로 개선되였다.

하트리-포크방정식을 풀기 위해서 적용되는 중요한 근사들중의 하나는 중심력마당근사이며 다른 하나는 비국부호상작용인 교환항을 유효국부포텐샬로 바꾸는 근사이다.[2, 3]

론문에서는 일반화된 하트리-포크방정식을 푸는데서 나서는 자체모순없는 마당방법 알고리듬에 대하여 고찰하였다.

1. 일반화된 하트리-포크방정식의 구대칭화

다립자계의 에네르기준위들을 동시에 구할수 있는 일반화된 하트리-포크방정식은 다음과 같다.[1]

$$\sum_{\beta} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \langle \beta_i' | \hat{f}_i | P\beta_i \rangle \prod_{k\neq i}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} \langle \beta_i'\beta_j' | \hat{g}_{ij} | P\beta_i P\beta_j \rangle \prod_{k\neq i,j}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} \right) = \mu b_{\beta'} \tag{1}$$

$$\sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^* b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \hat{f}_i | P\beta_i \rangle \delta_{\beta_i' l} \prod_{k\neq i}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} \langle \beta_j' | \hat{g}_{ij} | P\beta_j \rangle | P\beta_i \rangle \delta_{\beta_i' l} \prod_{k\neq i,j}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} \right) = \lambda_p | p \rangle \tag{2}$$

여기서 상태벡토르 $|\beta_i\rangle$는

$$|\beta_i\rangle = |nlm\rangle = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\Omega) \tag{3}$$

를 의미한다. 상태벡토르를 구면함수로 표시한것은 핵력을 중심력으로만 고찰하기때문이다. 여기서 스핀-궤도호상작용은 고찰하지 않는다.

먼저 식 (1)의 운동에네르기항을 계산하자. 간단히 표시하기 위하여 첨수에서 i를 1로, j를 2로 표시한다.

$$\langle\beta_i'|\hat{f}_i|P\beta_i\rangle = \langle n_1'l_1'm_1'|\hat{f}_i|n_1l_1m_1\rangle = -\frac{1}{2}\int dr\int d\Omega R_{n_1'l_1'}(r)Y_{l_1'm_1'}(\Omega)\Delta R_{n_1l_1}(r)Y_{l_1m_1}(\Omega) \tag{4}$$

$\Delta = (\Delta_r + \Delta_\Omega)/r^2$ 와 구면함수의 직교성과 고유값문제

$$\int d\Omega Y_{l_1'm_1'}(\Omega)Y_{l_1m_1}(\Omega) = \delta_{l_1'l_1}\delta_{m_1'm_1}, \quad -\Delta_\Omega Y_{l_1m_1}(\Omega) = l_1(l_1+1)Y_{l_1m_1}(\Omega) \tag{5}$$

와 동경부분파동함수의 직교성

$$\int dr\, R_{n_1'l_1}(r)R_{n_1l_1}(r) = \delta_{n_1'n_1} \tag{6}$$

을 고려하면 식 (4)는 다음과 같이 표시된다.

$$\begin{aligned}\langle\beta_i'|\hat{f}_i|P\beta_i\rangle &= -\frac{1}{2}\int drr^2\int d\Omega\frac{R_{n_1'l_1'}(r)}{r}Y_{l_1'm_1'}(\Omega)\Delta\frac{R_{n_1l_1}(r)}{r}Y_{l_1m_1}(\Omega) = \\ &= -\frac{1}{2}\delta_{l_1'l_1}\delta_{m_1'm_1}\int dr\, R_{n_1'l_1'}(r)\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{r^2}\right]R_{n_1l_1}(r)\end{aligned} \tag{7}$$

다음 식 (1)의 포텐샬부분을 계산하자.

$$\begin{aligned}&\langle\beta_i'\beta_j'|\hat{g}_{ij}|P\beta_iP\beta_j\rangle = \langle n_1'l_1'm_1';n_2'l_2'm_2'|\hat{g}_{ij}|n_1l_1m_1;n_2l_2m_2\rangle = \\ &= \int dr_1dr_2R_{n_1'l_1'}(r_1)R_{n_2'l_2'}(r_2)R_{n_1l_1}(r_1)R_{n_2l_2}(r_2)\int d\Omega_1d\Omega_2Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)v(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)\end{aligned} \tag{8}$$

여기서 핵력포텐샬을 중심력으로 보는 경우 $v(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ 는 거리만의 함수로 표시된다. 따라서 핵력포텐샬을 다음과 같이 르쟝드르다항식으로 전개할수 있다.

$$v(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|) = \sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)P_l(\cos\omega_{12}) \tag{9}$$

여기서 ω_{12} 는 벡토르 $\boldsymbol{r}_1$ 과 $\boldsymbol{r}_2$ 의 사이각이며 $C_l(r_1,r_2)$ 는 르쟝드르다항식전개결수로서

$$C_l(r_1,r_2) = \frac{2l+1}{2}\int_0^\pi v(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)P_l(\cos\theta)d\theta \tag{10}$$

이며

$$P_l(\cos\omega_{12}) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{lm}(\Omega_2) \tag{11}$$

이다. 이것을 식 (9)에 대입하면

$$v(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{lm}(\Omega_2) \tag{12}$$

를 얻는다. 식 (12)를 식 (8)의 각부분적분에 대입하면 각부분은

$$\begin{aligned}&\int d\Omega_1d\Omega_2Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)Y_{l_2m_2}(\Omega_2) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}\int d\Omega_1Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)\int d\Omega_2Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)\end{aligned} \tag{13}$$

로 된다. 구면함수의 성질

$$\int d\Omega Y_{l_1m_1}(\Omega)Y_{l_2m_2}(\Omega)Y^*_{l_3m_3}(\Omega)=\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)}}C^{l_3 0}_{l_1 0 l_2 0}C^{l_3m_3}_{l_1m_1l_2m_2} \tag{14}$$

을 리용하면(여기서 $C^{l_3 0}_{l_1 0 l_2 0}$, $C^{l_3m_3}_{l_1m_1l_2m_2}$ 는 클렙슈–고르단결수) 식 (13)은

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}\int d\Omega_1Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)\int d\Omega_2Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)=\\&=\sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_1'+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}}\sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)C^{l_1 0}_{l_1' 0 l 0}C^{l_2' 0}_{l_2 0 l 0}\sum_{m=-l}^{l}C^{l_1m_1}_{l_1'm_1'lm}C^{l_2'm_2'}_{l_2m_2lm}\end{aligned} \tag{15}$$

와 같이 된다. 클렙슈-고르단결수의 성질로부터 $m=m_1-m_1'=m_2'-m_2$ 가 나오는데 결국 식 (15)에서 m 에 관한 합기호는 없어진다. 즉

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}\int d\Omega_1Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)\int d\Omega_2Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)=\\&=\delta_{m_1-m_1',\,m_2'-m_2}\sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_1'+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}}\sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)C^{l_1 0}_{l_1' 0 l 0}C^{l_2' 0}_{l_2 0 l 0}C^{l_1m_1}_{l_1'm_1'lm_1-m_1'}C^{l_2'm_2'}_{l_2m_2lm_2'-m_2}\end{aligned}$$

이다. 따라서 식 (8)은 다음과 같다.

$$\begin{aligned}&\left\langle\beta_i'\beta_j'\left|\hat g_{ij}\right|P\beta_iP\beta_j\right\rangle=\delta_{m_1-m_1',\ m_2'-m_2}\sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_1'+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}}\cdot\\&\cdot\int dr_1dr_2R_{n_1'l_1'}(r_1)R_{n_2'l_2'}(r_2)R_{n_1l_1}(r_1)R_{n_2l_2}(r_2)\sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)C^{l_1 0}_{l_1' 0 l 0}C^{l_2' 0}_{l_2 0 l 0}C^{l_1m_1}_{l_1'm_1'lm_1-m_1'}C^{l_2'm_2'}_{l_2m_2lm_2'-m_2}\end{aligned} \tag{16}$$

클렙슈–고르단결수의 성질로부터 l 의 값범위는 $|l_1-l_1'|$ 와 l_1+l_1', $|l_2-l_2'|$ 와 l_2+l_2' 사이에 있다. 결국 l 의 값범위는 $|l_1-l_1'|$ 와 $|l_2-l_2'|$ 둘중에서 최대값, l_1+l_1' 와 l_2+l_2' 둘중에서 최소값사이에 있다. 따라서 식 (1)을 푸는 문제는 b 에 관한 동차련립방정식

$$\sum_{\beta=1}^{W}H_{\beta'\beta}b_\beta=\mu b_{\beta'} \tag{17}$$

의 풀이를 구하는 문제로 된다. 이 문제는 행렬 $H_{\beta'\beta}$ 의 고유값문제로 된다. 여기서

$$H_{\beta'\beta}=\sum_P\varepsilon_P\left(\sum_{i=1}^{N}\left\langle\beta_i'\left|\hat f_i\right|P\beta_i\right\rangle\prod_{k\neq i}^{N}\delta_{\beta_k',P\beta_k}+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}\left\langle\beta_i'\beta_j'\left|\hat g_{ij}\right|P\beta_iP\beta_j\right\rangle\prod_{k\neq i,j}^{N}\delta_{\beta_k',P\beta_k}\right) \tag{18}$$

이다.

다음 식 (2)를 계산하기 위하여 식 (2)의 량변에 $\left|p\right\rangle$ 의 각부분 $\left|l_pm_p\right\rangle$ 를 스칼라적하면 다음과 같이 된다.

$$\begin{aligned}&\sum_{\beta\beta'}b^*_{\beta'}b_\beta\sum_P\varepsilon_P\left(\sum_{i=1}^{N}\left\langle l_pm_p\left|\hat f\right|n_1l_1m_1\right\rangle\delta_{\beta_i'p}\prod_{k\neq i}^{N}\delta_{\beta_k'P\beta_k}+\right.\\&\left.+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N}\left\langle l_pm_p;n_2'l_2'm_2'\left|\hat g\right|n_1l_1m_1;n_2l_2m_2\right\rangle\delta_{\beta_i'p}\prod_{k\neq i,j}^{N}\delta_{\beta_k'P\beta_k}\right)=\\&=\lambda_p\left\langle l_pm_p\left|n_pl_pm_p\right.\right\rangle=\lambda_p\left|n_pl_p\right\rangle\end{aligned}$$

식 (1)을 계산할 때와 같은 절차를 거치면 운동에네르기부분은

$$\left\langle l_p m_p \left| \hat{f} \right| n_1 l_1 m_1 \right\rangle = \delta_{l_p l_1} \delta_{m_p m_1} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} R_{n_1 l_1}(r) + \frac{l_1(l_1+1)}{2r^2} R_{n_1 l_1}(r) \right] \tag{19}$$

와 같이 되며 포텐샬부분은 다음과 같다.

$$\left\langle l_p m_p ; n_2' l_2' m_2' \left| \hat{g} \right| n_1 l_1 m_1 ; n_2 l_2 m_2 \right\rangle = \delta_{m_1 - m_p, m_2' - m_2} R_{n_1 l_1}(r) \sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_p+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}} \cdot$$
$$\cdot \int dr_2 R_{n_2' l_2'}(r_2) R_{n_2 l_2}(r_2) \sum_{l=0}^{\infty} C_l(r, r_2) C_{l_p 0 l 0}^{l_1 0} C_{l_2 0 l 0}^{l_2' 0} C_{l_p m_p l m_1 - m_p}^{l_1 m_1} C_{l_2 m_2 l m_2' - m_2}^{l_2' m_2'} \tag{20}$$

식 (19)와 (20)을 식 (2)에 대입하고 정돈하면 다음과 같이 표현할수 있다.

$$A_p^{(p)}(r) R_{n_p l_p}(r) + \sum_{k \neq p}^{M} A_k^{(p)}(r) R_{n_k l_k}(r) = \lambda_{n_p l_p} R_{n_p l_p}(r) \tag{21}$$

여기서 $A_k^{(p)}(r)$는 식 (2)에서 p번째 식의 $R_{n_k l_k}(r)$결수들이며 $R_{n_k l_k}(r)$는 k번째 한립자상태의 동경부분파동함수이다.

2. 자체모순없는 마당방법

식 (21)은 련립미적분방정식으로서 보통의 계산수학적방법으로는 풀수 없다.

이제 식 (21)에서 결수 $A_k^{(p)}(r)$의 크기관계를 고찰하자. 식 (19)와 (20)에서 직교성 $\delta_{l_p l_1} \delta_{m_p m_1}$과 $\delta_{m_1 - m_p, m_2' - m_2}$에 의하여 주대각선성분들이 비대각선성분에 비하여 훨씬 크다는것을 알수 있다. 물리적으로 볼 때에도 p번째 준위에 핵자가 그 준위에 주는 영향이 다른 준위들에 놓이는 핵자들이 이 준위에 주는 영향보다 훨씬 크다는것은 자명하다.

이러한 고찰로부터 식 (21)에서 두번째 항은 핵자들의 상관효과를 반영한 항이라고 볼수 있다. 이 항을

$$\sum_{k \neq p}^{M} A_k^{(p)}(r) R_{n_k l_k}(r) = B_p^{(p)}(r) R_{n_p l_p}(r) \tag{22}$$

와 같이 변형시킬수 있다면 식 (21)은 다음과 같은 한립자파동함수에 관한 고유값문제로 넘어간다.

$$\widetilde{A}_p^{(p)}(r) R_{n_p l_p}(r) = \lambda_{n_p l_p} R_{n_p l_p}(r) \tag{23}$$

여기서

$$\widetilde{A}_p^{(p)}(r) = A_p^{(p)}(r) + B_p^{(p)}(r) \tag{24}$$

이다.

이제 $B_p^{(p)}(r)$를 구하는 방법에 대하여 고찰하자. 결수 $A_p^{(p)}(r)$와 $A_k^{(p)}(r)$ ($k \neq p$)의 노름관계

$$\| A_p^{(p)}(r) \| >> \| A_k^{(p)}(r) \| \qquad (k \neq p) \tag{25}$$

로부터

$$A_p^{(p)}(r)R_{n_pl_p}(r)+\sum_{k\neq p}^{M}A_k^{(p)}(r)R_{n_kl_k}(r)\approx(1+\Delta\lambda)A_p^{(p)}(r)R_{n_pl_p}(r)$$

로 놓을수 있다. 여기서

$$\Delta\lambda=\frac{\left\|\sum_{k\neq p}^{M}A_k^{(p)}(r)R_{n_kl_k}(r)\right\|}{\|A_p^{(p)}(r)R_{n_pl_p}(r)\|}\tag{26}$$

이다. 따라서

$$B_p^{(p)}(r)=\Delta\lambda A_p^{(p)}(r)\tag{27}$$

로 놓으면 근사적으로 식 (22)를 만족시킨다고 볼수 있다.

이상의 결과를 종합하면 자체모순없는 마당방법을 적용하는 순서는 다음과 같다.

첫째로, 초기 한립자동경부분파동함수들을 선택한 다음 방정식 (17)을 풀어 핵의 에네르기준위들과 전개결수 b_β 들을 구한다.

둘째로, 매 준위에 대응하는 전개결수 $A_k^{(p)}(r)$ 를 계산하고 식 (26), (27)에 따라 $B_p^{(p)}(r)$ 를 결정하며 식 (23)을 풀어 갱신된 한립자동경부분파동함수와 한립자분리에네르기를 구한다.

셋째로, 한립자동경부분파동함수와 한립자분리에네르기가 더이상 변하지 않을 때까지 우의 과정을 반복한다.

맺 는 말

일반화된 하트리–포크방정식을 자체모순없는 마당방법으로 풀기 위한 중심력근사를 진행하고 상관영향을 반영한 비국부항을 국부항으로 넘기는 한가지 방법을 제기하였다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보 물리학, 65, 1, 124, 주체108(2019).

[2] F. Schwabl; Advanced Quantum Mechanics, 4th Edition, Springer, 41～51, 2008.

[3] M. Hjorth-Jensen; Computational Physics, University of Oslo, 485～507, 2012.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Study on the Application of Self-Consistent Field Method in Solving the Generalized Hartree-Fock Equation

Kim Yong Song, *Kim Thae Song* and *O Su Il*

We adopted the central force approximation and proposed a method to transform the non-local term reflected the correlation between nucleons into the local one to solve the generalized Hartree-Fock equation with the self-consistent field method.

Key words: Hartree-Fock approximation, many-body problem, self-consistent field method