《现代物理快报A》© World Scientific PublishingCompany

arXiv:2304.14995v2 [math.AP] 8 Apr 2024

托马斯–费米方程的马约拉纳变换揭秘

Abdaljalel Alizzi*Novosibirsk State University*, 630 090, *Novosibirsk*, *Russia*.*abdaljalel90@gmail.com*

祖拉布·K·西拉加泽*Budker Institute of Nuclear Physics and Novosibirsk State University*, 630 090, *Novosibirsk*, *Russia*.*silagadze@inp.nsk.su*

收稿日期（日月 年） 修订日期（日 月 年）

马约拉纳变换可以将托马斯-费米方程化简为一阶微分方程。这种化简之所以可行，是因为托马斯-费米方程在相似变换下具有特殊的缩放性质。在恒星天体物理学领域，此类化简方法早已广为人知，运用同源不变量也长期以来被证明十分有用。我们将同源不变量用于托马斯-费米方程，以揭示原本令人费解的马约拉纳变换的由来。

Keywords: 托马斯-费米方程；莱恩-埃姆登方程；埃姆登–福勒方程；马约拉纳变换；同源不变量

1. 引言

Llewellyn H. Thomas 和恩里科·费米分别提出了多电子原子的半经典统计模型，1926 [1,2]。该模型的基本概念是将原子核周围的电子云视为简并的费米–狄拉克流体；在自洽电场中，该流体于绝对零度下处于流体静力学平衡状态。哈特里–福克自洽场模型可以通过托马斯–费米方法以半经典方式近似，从而得以对托马斯–费米模型进行诸多改进[3]。

局域电子密度是托马斯–费米方法中的关键变量，该方法完全不考虑多电子波函数。从这一意义上说，托马斯–费米模型是最简单的密度泛函理论[4]。随着托马斯–费米模型的发展，最终迎来了 Hohenberg 和 Kohn [5] 以及 Kohn 和 Scham[6]的开创性论文，现代密度泛函理论由此诞生，并已成为化学和材料科学[7,8]领域中非常有效的工具。

优雅而直观的托马斯–费米模型引发了大量相关文献，这并不令人意外

。我们仅提及其中的几篇综述 [9,10,11] 和教材论述 [12,13,14,15,16]。

马约拉纳于1928年发现了托马斯-费米方程的一种引人入胜的变换，但他从未发表这一发现，直到最近才有人注意到[17,18,19]。马约拉纳变换的起源似乎颇为神秘，它能够降低托马斯-费米方程的阶数，这对于该方程的几何理论很有用 [20]。进一步研究表明，这种降阶之所以可行，是因为托马斯-费米方程具有尺度不变性；马约拉纳的方法也可应用于满足马约拉纳型尺度关系的其他常微分方程[21]。从Lampariello动力系统的角度来看，马约拉纳变换似乎也不那么令人费解 [22]。然而，正如其著名作者的命运[23]一样，这种变换至今仍笼罩着一层神秘色彩。

令我们惊讶的是——或许这也不足为奇，因为我们并非第一个从钱德拉塞卡的杰作 [24] 中获得灵感的人[25]——这一洞见竟源自一个完全出乎意料的领域，即对恒星天体结构的研究。

托马斯-费米方程出现后不久，米尔恩就注意到，它与用于研究恒星多方多项式平衡的莱恩-埃姆登方程相似 [26]。埃姆登早已将该方程化简为一个一阶方程，而这种化简之所以可行，与莱恩-埃姆登方程在相似变换下的不变性密切相关 [27,25]。

在这篇简短的论文中，我们认为，托马斯-费米方程在相似变换下的不变性是揭开马约拉纳变换之谜的关键，并使其得以得到完整阐释。

2. 同源不变量与埃姆登-福勒方程的约化

我们用如下形式的埃姆登-福勒方程来说明主要思路（埃姆登-福勒方程的这一特例本质上等价于莱恩-埃姆登方程） [28]

$$y''(x) = x^{1-p} y^p(x), \tag{1}$$

其中撇号表示对 x求导，且 p 是某个实数。这个二阶微分方程的通解必须由两个积分常数确定。然而，方程（1）在相似变换下保持不变

$$x \to \lambda x, \quad y \to \lambda^{-q} y, \quad q = \frac{3-p}{p-1}. \tag{2}$$

换言之，如果 $y(x)$ 是方程（1）的一个解，那么对任意实数 λ，与之具有齐次关系的函数 $y_\lambda(x) = \lambda^{-q} y(\lambda x)$ 也是同一方程的一个解。

那么，一个积分常数必定是平凡的，也就是说，它只决定缩放因子 λ，而且方程必须能够化为一阶形式 [25,29]。

事实上，在这种情况下，有无穷多种方法可以将其化为一阶微分方程，因为我们只需选择同源不变量[25,29]即可。例如，我们可以使用 Coppel 的齐次不变量 [28,30]

$$v = \frac{xy'}{y}, \quad u = \frac{x^{2-p}y^p}{y'}, \quad uv = x^{3-p}y^{p-1}. \tag{3}$$

显然，$x\frac{du}{dx}$和 $x\frac{dv}{dx}$本身就是齐次不变量，我们预期它们可以表示为 v 和 u的函数。事实上，简单计算即可证实这一点（其中用到了（1））：

$$x\frac{dv}{dx} = x\left[\frac{y'}{y} + \frac{xy''}{y} - \frac{xy'^2}{y^2}\right] = x\frac{y'}{y} + x^{3-p}y^{p-1} - x^2\frac{y'^2}{y^2} = v + uv - v^2, \tag{4}$$

and

$$x\frac{du}{dx} = x\left[(2-p)\frac{x^{1-p}y^p}{y'} + px^{2-p}y^{p-1} - \frac{x^{2-p}y^p}{y'^2}y''\right] =$$
$$(2-p)\frac{x^{2-p}y^p}{y\prime} + px^{3-p}y^{p-1} - \frac{x^{2(2-p)}y^{2p}}{y'^2} = (2-p)u + puv - u^2. \tag{5}$$

因此，与埃姆登-福勒方程（1）等价的一阶方程为

$$\frac{du}{dv} = \frac{u\,(2-p+pv-u)}{v\,(1+u-v)}. \tag{6}$$

任意两个线性无关的同源不变量都能发挥类似作用，将埃姆登-福勒方程化为等价的一阶方程。例如，我们可以使用米尔恩齐次不变量，它们在天体物理学中广为人知（请注意，为避免变量过多，我们沿用相同的记号 u 和 v，尽管它们现在含义不同） [25,29]:

$$v = \frac{x\theta'}{\theta}, \quad u = \frac{x\theta^p}{\theta'}, \quad uv = x^2\theta^{p-1}, \tag{7}$$

其中 $\theta = y/x$，并且用 θ 方程（1）可以化为莱恩-埃姆登方程（在恒星天体物理学中，莱恩-埃姆登方程右侧的 θ^p 项符号相反）

$$\theta'' + \frac{2}{x}\theta' = \theta^p. \tag{8}$$

简单计算即可得出

$$x\frac{dv}{dx} = v(u-v-1), \quad x\frac{du}{dx} = u(3+pv-u), \tag{9}$$

因此，在这种情况下，一阶方程的形式为

$$\frac{du}{dv} = \frac{u(3+pv-u)}{v(u-v-1)}. \tag{10}$$

3. 马约拉纳齐次不变量

托马斯-费米方程是埃姆登-福勒方程（1）的一个特例，其中有$p = 3/2$。容易验证，在这种情况下，以下变量是齐次不变的

$$t = ax^{1/2}y^{1/6}, \quad u = by^{-4/3}y', \tag{11}$$

其中 a 和 b 是一些常数。我们有

$$x\frac{dt}{dx} = \frac{a}{2}x^{1/2}y^{1/6} + \frac{a}{6}x^{3/2}y^{-5/6}y' = \frac{1}{2}t + \frac{a}{6}x^{3/2}y^{-5/6}y'. \tag{12}$$

But

$$x^{3/2}y^{-5/6}y' = x^{3/2}y^{3/6}\,y^{-8/6}y' = \frac{t^3}{a^3}\,\frac{u}{b}.$$

因此，

$$x\frac{dt}{dx} = \frac{t}{2}\left[1 + \frac{1}{3a^2b}\,t^2u\right]. \tag{13}$$

另一方面，

$$x\frac{du}{dx} = -\frac{4}{3}bxy^{-7/3}y'^2 + bxy^{-4/3}y'', \tag{14}$$

and

$$xy^{-7/3}y'^2 = xy^{2/6}\,y^{-16/6}y'^2 = \frac{t^2}{a^2}\,\frac{u^2}{b^2}, \quad xy^{-4/3}y'' = x^{1/2}y^{1/6} = \frac{t}{a}.$$

因此，

$$x\frac{du}{dx} = \frac{bt}{a}\left[1 - \frac{4}{3ab^2}\,tu^2\right]. \tag{15}$$

将（15）除以（13），得到一阶方程

$$\frac{du}{dt} = 2\frac{b}{a}\,\frac{1 - \frac{4}{3ab^2}\,tu^2}{1 + \frac{1}{3a^2b}\,t^2u}. \tag{16}$$

我们可以选择 a 和 b，使这个方程尽可能简单。马约拉纳的选择对应于

$$\frac{4}{3ab^2} = 1, \quad \frac{1}{3a^2b} = -1, \tag{17}$$

由此立即得到

$$a = 12^{-1/3} = 144^{-1/6}, \quad b = -4a = -\left(\frac{16}{3}\right)^{1/3}. \tag{18}$$

众所周知，当 $x \to \infty, y \to 144/x^3$ 时，在渐近情况下如此。因此不难看出，马约拉纳的选择非常方便：当 x 从 0 变为 ∞ 时，t 也从 0 变为 1；对于 u，作为 t 的函数，我们有 $u(1) = 1$。如果你不介意 t 的负区间，同样简单的选择是 $\frac{4}{3ab^2} = -1$, $\frac{1}{3a^2b} = 1$。

马约拉纳变换

$$t = 144^{-1/6} x^{1/2} y^{1/6}, \quad u = -\left(\frac{16}{3}\right)^{1/3} y^{-4/3} y', \tag{19}$$

这使得可以将托马斯-费米方程化为一阶方程

$$\frac{du}{dt} = -8\,\frac{1 - tu^2}{1 - t^2 u}, \tag{20}$$

若凭空看来，这似乎神秘莫测，犹如魔术师从帽子里变出一只兔子。然而，对那些了解这一魔术奥秘的人来说，这里并没有什么魔法：马约拉纳变量不过是另一组同源不变量。

4. Dresner 同源不变量

谜题的最后一层疑云，是马约拉纳为何选择这样的同源不变量。这个选择看起来并非显而易见，因为乍看之下很难猜出这些变量。对于这个谜题，我们可以给出以下一种可能的答案。

对于托马斯-费米模型，最简单、最自然的同源不变量是 [31]

$$\tau = x^3 y, \quad s = x^4 y'. \tag{21}$$

显然，它们在同调变换 $x \to \lambda x$, $y \to \lambda^{-3} y$ 下是不变量。对于这些变量，

$$x\frac{d\tau}{dx} = 3\tau + s, \quad x\frac{ds}{dx} = 4s + \tau^{3/2}, \tag{22}$$

因此

$$\frac{ds}{d\tau} = \frac{4s + \tau^{3/2}}{s + 3\tau}. \tag{23}$$

我们或许希望消去 $\tau^{3/2}$ 中的无理性，并通过以下方式引入新变量 t 和 u

$$\tau = At^n, \quad s = Bt^m u, \tag{24}$$

其中 n 是偶整数，而 A 和 B 是一些常数。还要注意，$s^3/\tau^4 = y'^3/y^4$ 不依赖于自变量 x。因此，自然要要求这个比值也不依赖于新的自变量 t，而这只有在 $4n - 3m = 0$ 时才可能成立。对于偶数 n，满足这一关系的最小整数 n 和 m 为 $n = 6, m = 8$。经过一些简单的代数运算后，我们得到

$$\frac{ds}{d\tau} = \frac{B}{6A}\left[8t^2 u + t^3 \frac{du}{dt}\right] = \frac{4Bt^2 u + A^{3/2} t^3}{Bt^2 u + 3A}. \tag{25}$$

对该方程求解 $\frac{du}{dt}$，得到

$$\frac{du}{dt} = \frac{6A}{B}\,\frac{A^{3/2} - \frac{4B^2}{3A} tu^2}{3A + Bt^2 u} = 2\,\frac{A^{3/2}}{B}\,\frac{1 - \frac{4B^2}{3A^{5/2}} tu^2}{1 + \frac{B}{3A} t^2 u}. \tag{26}$$

接下来需要以合适的方式选取常数 A 和 B，为此我们要求

$$\frac{4B^2}{3A^{5/2}} = 1, \quad \frac{B}{3A} = -1. \tag{27}$$

解为 $A = 144$, $B = -3A$，并可得马约拉纳方程（20）和马约拉纳变换（19）。对于 $t = A^{-1/6}\tau^{1/6} = 144^{-1/6}x^{1/2}y^{1/6}$，这一点显而易见；而对于 u，我们可以使用

$$u = \frac{A^{4/3}}{B}\frac{s}{\tau^{4/3}} = -\frac{1}{3}A^{1/3}\frac{y'}{y^{4/3}} = -\left(\frac{16}{3}\right)^{1/3} y^{-4/3}y'.$$

要得到解 $y(x)$，必须能够从齐次不变量变换回原始变量 (x, y)。可以按以下方式进行。对第一个方程（21）两边关于 τ 取对数导数，得到

$$\frac{dy}{y} = \frac{d\tau}{\tau} - 3\frac{dx}{x}. \tag{28}$$

但（22）表明

$$\frac{dx}{x} = \frac{d\tau}{3\tau + s}.$$

因此

$$\frac{dy}{y} = \frac{s d\tau}{\tau(3\tau + s)}. \tag{29}$$

在原始变量 (x, y) 中，一个边界条件为 $y(0) = 1$，而（21）表明 $\tau = 0$，若 $x = 0$。因此，（29）确定了 y 关于 τ的函数，随后 $x = (\tau/y)^{1/3}$是关于 τ的函数，前提是已知一阶方程（23）的解 $s(\tau)$:

$$y(\tau) = \exp\left(\int_0^\tau \frac{s(\sigma)\, d\sigma}{\sigma[3\sigma + s(\sigma)]}\right), \quad x(\tau) = \tau^{1/3}\exp\left(-\int_0^\tau \frac{s(\sigma)\, d\sigma}{3\sigma[3\sigma + s(\sigma)]}\right). \tag{30}$$

这些关系构成了原始托马斯–费米问题的参数解。利用（24），我们可以很容易地用马约拉纳变量表示这个参数解:

$$y(t) = \exp\left(\int_0^t W(\sigma)d\sigma\right), \quad x(t) = 144^{1/3}t^2\exp\left(-\frac{1}{3}\int_0^t W(\sigma)d\sigma\right), \tag{31}$$

其中

$$W(t) = -\frac{6tu(t)}{1 - t^2u(t)}. \tag{32}$$

更多详细信息可参见 [21] 其中还讨论了一些微妙之处 [20]

5. 总结

马约拉纳于1928年采用的、用于求得托马斯-费米方程半解析解的方法一直未曾发表，也鲜为人知，直到2002年 Esposito 在一篇启发性的教学文章中揭示了这一方法。[21]马约拉纳极其精妙的变量变换，其由来或许令人费解。在本文中，我们尝试借助同源不变量这一恒星天体物理学领域广为人知的技巧，揭开马约拉纳变换的奥秘。采用这一方法后，马约拉纳变换便显得自然而清晰；由于这种方法十分简洁，人们不禁会认为，马约拉纳正是这样发现这一变换的。

致谢

我们谨向审稿人致谢，感谢他们提出的宝贵意见。

参考文献

1. L. H. Thomas, *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.* **23**, 542（1927年）。2. E. Fermi, *Rendiconti: Accademia Nazionale dei Lincei* **6**, 602（1927年）。3. A. S. Kompaneets 和 E. S. Pavlovskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **31**, 427（1956）。4. J. Morgan III, 《托马斯–费米理论及其他密度泛函理论》，载于 *Springer Hand-book of Atomic, Molecular and Optical Physics*, G. Drake 编（施普林格，纽约，2006年），第295–306页。5. P. Hohenberg 和 W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864（1964）。6. W. Kohn 和 L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133（1965）。7. K. Burke, *J. Chem. Phys.* **136**, 150901（2012年）。8. R. O. Jones 和 O. Gunnarsson, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 689（1989）。9. N. March, *Advances in Physics* **6**, 1（1957）。10. L. Spruch, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 151（1991）。11. R. G. Parr 和 Y. Weitao, 《托马斯–费米理论及相关模型》，载于 *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, （牛津大学出版社，牛津，1995年），第105–141页。12. H. A. Bethe 和 R. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics* （CRC出版社，博卡拉顿，1997年）。13. S. Fl¨ugge, *Practical Quantum Mechanics* （施普林格-弗拉格出版社，柏林，1999年）。14. H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, andFinancial Markets*, 第5版（世界科学出版社，新加坡，2009年）。15. L. Landau 和 E. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory* （佩加蒙出版社，纽约，1991年）。16. D. Budker、D. F. Kimball 和 D. P. Demille, *Atomic Physics: An Exploration ThroughProblems and Solutions*, 第2版（牛津大学出版社，牛津，2008年）。17. S. Esposito, *Am. J. Phys.* **70**, 852（2002年）。18. E. Di Grezia 和 S. Esposito, *Foundations of Physics* **34**, 1431（2004年）。19. S. Esposito, *The physics of Ettore Majorana: Phenomenological, Theoretical, andMathematical* （剑桥大学出版社，剑桥，2015年）。20. W. M. Seiler 和 M. Seiß, *Appl. Math. Comput.* **466**, 128446（2024年）。21. S. Esposito, *Int. J. Theor. Phys.* **41**, 2417（2002年）。22. H. C. Rosu 和 S. C. Mancas, *Physica A: Stat. Mech. Appl.* **471**, 212（2017年）。

23. S. Esposito, *Ettore Majorana: Unveiled Genius and Endless Mysteries*（施普林格国际出版，Cham，2017年）。24. P. P. Eggleton, *Pramana* **77**，97（2011年）。25. S. Chandrasekhar, *An introduction to the study of stellar structure*（芝加哥大学出版社，芝加哥，1939年）。26. E. A. Milne, *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.* **23**，794–799（1927年）。27. E. Hopf, *Mon. Notices Royal Astron. Soc.* **91**，653（1931年）。28. E. Hille, *Journal d'Analyse Mathématique* **23**，147（1970年）。29. G. P. Horedt, *Polytropes: Applications in Astrophysics and Related Fields*（施普林格，多德雷赫特，2004年）。30. W. Coppel, *J. Diff. Eqn.* **2**，293（1966年）。31. L. Dresner, *Applications of Lie's Theory of Ordinary and Partial Differential Equations* 1998（CRC出版社，博卡拉顿，）。