

## ИСПРАВЛЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ВЕЩЕСТВА В ОКРЕСТНОСТИ ЯДЕР

*Д.А.Киржниц, Г.В.Шпатаковская\**

*Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН  
117924 Москва, Россия*

*\*Институт математического моделирования РАН  
125047 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 9 марта 1994 г.

Найдены квантовые поправки к энергии и давлению "холодного вещества", исправленные вблизи ядра, где непригодно квазиклассическое приближение. Эти поправки имеют конечную величину, для изолированного атома дают поправку Скотта и исчезают в пределе высоких сжатий по закону, согласующемуся с результатами точного квантово-механического расчета.

Лежащее в основе модели Томаса-Ферми (МТФ) условие квазиклассичности нарушено на малых расстояниях от ядра  $r < r_0$ , где  $r_0$  равно соответственно  $Z^{-1}$  и  $(Z/n)^{1/2}$  (в атомных единицах) в областях

$$n \ll Z^3 \text{ (А)}, \quad n \gg Z^3 \text{ (Б)}, \quad (1)$$

$Z \gg 1$  – заряд ядра,  $n$  – концентрация электронов. Поэтому отвечающая МТФ величина энергии заметно отличается от своего точного значения. По той же причине квантовые поправки, вводимые для уменьшения этого отличия, а) расходятся в точке  $r = 0$ , и б) их конечная часть не исчезает, в противоречии с теорией возмущений, в области (1Б). Подобные же трудности присущи и "горячему" случаю, который будет рассмотрен отдельно.

Ряд способов преодоления трудности а) описан в литературе [1–7]. Так, учет точных кулоновских выражений для энергии глубоких уровней несжатого атома, отвечающих движению в области  $r < r_0$ , где

$$U \simeq -Z/r \quad (2)$$

( $U$  – самосогласованное поле), ведет к эффективному обрезанию расходимостей на длине  $r_0$  и к замене их поправкой Скотта  $E_{Sc} = Z^2/2$  (см. [1–4]).

В этой заметке рассмотрен общий подход, единым образом устраняющий обе трудности а) и б). Он дает выражение для исправленной (индекс  $c$ ) квантовой поправки к энергии низшего, второго порядка (индекс 2)

$$\delta_2 E^c = \frac{2}{9} E_{ex} + E_{Sc} + \Delta, \quad (3)$$

где  $E_{ex}$  – обменная поправка [8], а величина  $\Delta$  (см. ниже формулу (11)) такова, что выражение (3) обладает нужными свойствами.

1. Введем разность  $\delta A$  квантово-механического (в приближении Хартри) и отвечающего МТФ значений величины  $A$ . Для энергии системы такая разность имеет вид [8]

$$\delta E = - \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' \delta N(\mu') = -2 \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' (\mu - \mu') \delta \rho(\mu'), \quad (4)$$

где  $N$  – полное число частиц,  $\rho$  – плотность уровней,

$$N = 2 \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' \rho(\mu'), \quad \rho(\mu) = \text{tr} \delta(\mu - \hat{H}), \quad \hat{H} = \hat{p}^2/2 + U(\mathbf{x}),$$

$$\delta\rho(\mu) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d\mathbf{x} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}|\mu) - \int d\mathbf{x} p_0(\mathbf{x})/2\pi^2, \quad (5)$$

$G$  – запаздывающая функция Грина,  $p_0 = [2(\mu - U)]^{1/2}$  – импульс Ферми.

При положительном химическом потенциале вместо (4) удобнее применять выражение (здесь и далее  $M \rightarrow \infty$ )

$$\delta E = \frac{Z^2}{4} + 2 \int_{\mu}^M d\mu' (\mu - \mu') \delta\rho(\mu'), \quad (6)$$

к которому ведут выводимые из (5) правила сумм

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mu' \delta\rho(\mu') = 0, \quad \int_{-\infty}^M d\mu' \mu' \delta\rho(\mu') = \frac{Z^2}{8}.$$

2. Во втором порядке по градиентам находим [9]

$$\delta_2\rho(\mu) = \frac{1}{192\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial\mu^2} \int d\mathbf{x} \left[ 4p_0 \Delta p_0^2 + \frac{(\nabla p_0^2)^2}{p_0} \right].$$

Уравнение Томаса–Ферми

$$\Delta p_0^2 = \frac{8}{3\pi} p_0^3 - 8\pi Z \delta(\mathbf{x}) \quad (7)$$

и равенство  $(\nabla p_0^2)^2/2p_0 = \nabla(p_0 \nabla p_0^2) - p_0 \Delta p_0^2$  позволяют выделить из величины (6) расходимости, порожденные особенностью кулоновского взаимодействия в точке  $r=0$  и обозначаемые далее символом *inf*,

$$\delta_2 E = \frac{2}{9} E_{ex} + \frac{Z^2}{4} + \text{inf}, \quad (8)$$

где

$$E_{ex} = -\frac{1}{4\pi^3} \int d\mathbf{x} p_0^4$$

– обменная поправка.

3. Для устранения присущих (8) трудностей используем соотношение (2) и тот факт, что для кулоновского поля известно точное решение задачи. Исправленное выражение для  $\delta_2 E$  выбирается в виде<sup>1)</sup>

$$\delta_2 E^c = \delta_2 E - \delta_2 \tilde{E} + \delta \tilde{E}, \quad (9)$$

где тильда отвечает вспомогательной системе с тем же значением  $\mu$ , электроны которой взаимодействуют только с ядром ( $U = -Z/r$  при всех  $r$ ). Ниже мы

<sup>1)</sup>См. Г.В.Шпатаковская. Дипломная работа. МГУ. 1969.

ограничимся случаем неотрицательного химического потенциала  $\mu$ , когда во вспомогательной системе согласно (6) дискретный спектр не дает вклада, то есть отсутствуют оболочечные поправки. Вклады первых двух членов правой части (9) в области  $r < r_0$ , где выполнено (2), взаимно компенсируются и остается точное решение кулоновской задачи. В области же  $r > r_0$ , где движение квазиклассично, компенсируются вклады двух последних членов (9) и остается исходная квантовая поправка.

Действуя как и в разд. 2, но учитывая отсутствие первого члена правой части (6) и следующее отсюда неравенство  $\int dx \Delta p_0^2 = -8\pi Z \neq 0$ , находим

$$\delta_2 \tilde{E} = \frac{Z}{6\pi} (\sqrt{2\mu} - \sqrt{2M}) + \frac{Z^2}{4} + \text{inf}. \quad (10)$$

Здесь величина *inf* та же, что и в (8), и поэтому она выпадает из ответа.

4. Формулы (5), (6) и выражение для кулоновской функции Грина [10]

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \mu) = \frac{ik}{2\pi} \int_1^\infty ds \exp(i\alpha) J_0(\beta),$$

$$k = \sqrt{2\mu}, \quad \alpha = k(r + r')s + \frac{Z}{k} \ln \frac{s+1}{s-1}, \quad \beta = k[2(rr' + \mathbf{x}\mathbf{x}')(s^2 - 1)]^{1/2},$$

$$r = |\mathbf{x}|, \quad r' = |\mathbf{x}'|,$$

ведут к соотношению

$$\delta \tilde{E} = E_{Sc} + \frac{Z}{6\pi} (\sqrt{2\mu} - \sqrt{2M}) + \frac{Z^2}{\pi} f(\sigma), \quad (11)$$

где  $\sigma = Z/\sqrt{2\mu}$  — кулоновский параметр теории возмущений.

Вводя среднее

$$\langle a(y) \rangle_n = \frac{n}{y^n} \int_0^y dx x^{n-1} a(x),$$

можно выразить  $f(\sigma)$  через гамма-функцию мнимого аргумента

$$f(\sigma) = \text{Im}(\ln \Gamma(i\sigma))_2 - 2\sigma(\ln \sigma - 4/3)/3 + 1/6\sigma + \pi/4.$$

В областях (1А) ( $\sigma \gg 1$ ) и (1Б) ( $\sigma \ll 1$ ) функция  $f(\sigma)$  равна соответственно

$$1/180\sigma^3 + O(1/\sigma^5), \quad 1/6\sigma - \pi/4 + O(\sigma).$$

5. Подстановка (8), (10), (11) в (9) и сравнение с (3) дают конечное выражение, свободное от трудности а) (см. начало статьи),

$$\Delta = \frac{Z^2}{\pi} f(\sigma). \quad (12)$$

В области (1А)  $\Delta$  мало, и ответ сводится к сумме  $\frac{2}{9}E_{ex} + E_{Sc}$  (тот же результат справедлив и для несжатого атома с  $\mu = 0$ , см. [1-4]). В области же (1Б) величина  $\Delta$  компенсирует квантовую поправку  $\frac{2}{9}E_{ex}$  (остаток  $Z^2/4$  в

этой области мал), и энергия, согласно с теорией возмущений, равна сумме кинетической, маделунговской и обменной составляющих [8].

Прямой интерес представляет исправленная поправка к давлению  $P = -\partial E/\partial V$ , явное выражение для которой мы приведем для области  $n \gg Z^2$ , где электронный газ практически однороден и

$$p_0 = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad \mu = p_0^2/2, \quad \sigma = Z/p_0.$$

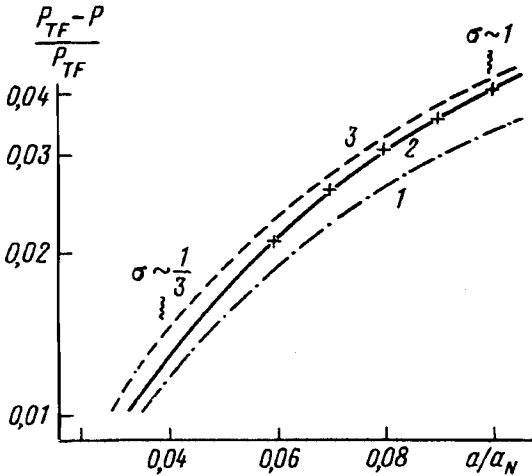
В этой области корреляционные эффекты малы, и мы вправе сравнивать модели самосогласованного поля с точным решением. Вводя дигамму-функцию  $\psi = \Gamma'/\Gamma$ , получаем

$$\delta_2 P^c = -\frac{2}{27} \frac{Z^4}{\pi^3 \sigma^2} [\text{Re}(\psi(i\sigma))_3 - \ln \sigma + 1/3]. \quad (13)$$

В области (1А) эта величина сводится к

$$\delta_2 P = \frac{2}{9} P_{ex} = -\frac{Z^4}{54\pi^3 \sigma^4},$$

в области (1Б) ее вкладом можно пренебречь:  $\delta_2 P^c/P_{ex} \sim \sigma^2 \ln \sigma$ .



Сравнение различных моделей уравнения состояния алюминия: 1 – МТФ с обменной поправкой  $P_{ex}$  (теория возмущений), 2 – МТФ с обменной и неисправленной квантовой поправкой  $\delta_2 P$  (модель ТФП), 3 – МТФ с обменной и исправленной квантовой поправкой (13), + – метод присоединенных плоских волн;  $a/a_N$  – приведенная постоянная решетки,  $a_N = 7,65288$ ,  $\sigma$  – кулоновский параметр теории возмущений

6. В заключение рассмотрим переходную от (1А) к (1Б) область. На приводимом рисунке представлено относительное отклонение от МТФ результатов расчета давления алюминия как функции сжатия по различным моделям в указанной области  $n \gg Z^2$ . Налицо достаточно хорошее количественное совпадение результатов изложенной выше теории и полного квантово-механического расчета методом присоединенных плоских волн [11].

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований.

1. J.M.C.Scott, Phil. Mag. **43**, 859 (1952).
2. G.I.Plindov and I.K.Dmitrieva, Phys. Lett. A **64**, 348 (1978).
3. J.Schwinger, Phys. Rev. A **22**, 1827 (1980).

4. B.-G. Englert, *Semiclassical Theory of Atoms* v.300 of *Lecture Notes in Physics*, Springer, Berlin, 1988.
5. Е.С.Фрадкин, *ЖЭТФ* **36**, 1533 (1959).
6. Д.А.Киржниц, *Труды ФИАН* **16**, 3 (1961).
7. Н.Н.Калиткин, Л.В.Кузьмина, *ФГТ* **12**, 2314 (1971).
8. Д.А.Киржниц, Ю.Е.Лозовик, Г.В.Шпатаковская, *УФН* **117**, 3 (1975).
9. Д.А.Киржниц, *Полевые методы теории многих частиц*. М.: Атомиздат, 1963. D.A.Kirzhnits, *Field-Theoretical Methods in Many-Body Systems.*, Oxford, Pergamon Press, 1967.
10. L.Hostler, *J. Math. Phys.* **5**, 591 (1964).
11. A.K.McMahan and M.Ross, *High Pressure Science and Technology*, v.2 Plenum, New York, 1979.