Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. С. Кузьменков, С. Г. Максимов, В. В. Федосеев, Микроскопическая квантовая гидродинамика систем фермионов. II, *ТМФ*, 2001, том 126, номер 2, 258–270

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf429>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.162.27.143

26 апреля 2023 г., 13:02:31

© 2001 г. Л. С. Кузьменков*, С. Г. Максимов*, В. В. Федосеев*

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ КВАНТОВАЯ ГИДРОДИНАМИКА СИСТЕМ ФЕРМИОНОВ. II

На основании развитого ранее метода исследования многочастичных фермионных систем получена замкнутая система нестационарных уравнений для многоэлектронного атома, включающая в себя в качестве частного случая известный метод Томаса–Ферми–Дирака. Рассчитаны спин-спиновые обменные корреляции с использованием корректного гамильтониана спин-спинового взаимодействия. Для стационарных состояний атома найдена зависимость электронной концентрации от потенциала самосогласованного электрического поля и дискретного набора параметров, определяемых полными энергией и моментом импульса атома.

Развитый в работе [1] общий метод получения замкнутого аппарата микроскопической квантовой гидродинамики предполагает вычисление корреляционных функций. Эти функции могут быть вычислены с использованием итерационной процедуры. В качестве нулевой итерации возьмем ортогональные одночастичные волновые функции, являющиеся решениями одночастичного уравнения Шредингера (I-45) (здесь и далее мы ссылаемся на формулы работы [1] как (I-N), где N – номер формулы в части I данной работы), в котором из полного взаимодействия оставим лишь взаимодействие спина с внешним магнитным полем. Учет этого взаимодействия необходим для получения зависимости обменных корреляционных функций от плотности собственного магнитного момента электронов. Пренебрежение этим членом в одночастичном гамильтониане приведет к существенной потере информации о спине в уравнениях квантовой гидродинамики. Таким образом, одночастичное уравнение Шредингера в нулевой итерации принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_f}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \varphi_f - \mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{B}_0) \varphi_f. \quad (1)$$

Очевидно, что координатная и спинорная части волновой функции φ_f разделяются, и мы получаем уравнение для спинора w :

$$i\hbar \frac{\partial w}{\partial t} = -\mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{B}_0) w, \quad (2)$$

*Московский государственный университет, Москва, Россия. E-mail: lsk@nabla.phys.msu.ru, sergey@teor242.phys.msu.ru, wladdy@teor242.phys.msu.ru

где спинор w связан с φ_f соотношением

$$\varphi_f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p}\mathbf{r})\right\} w_f(t), \quad \varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}.$$

Предположим также, что спины всех электронов прецессируют, оставаясь в каждый момент времени параллельными или антипараллельными, т.е. система спинов прецессирует как единое целое. В дальнейших расчетах нам понадобится поляризационная матрица плотности в произвольный момент времени t

$$\hat{\rho}_{\sigma}(t) = w_{\sigma}(t) w_{\sigma}^{\dagger}(t) = \frac{1}{2}(1 + \sigma(\hat{\sigma}\mathbf{f}(t))), \quad (3)$$

где $\mathbf{f}(t)$ – единичный вектор, определяющий направление магнитного момента электрона в произвольный момент времени и равный

$$\mathbf{f}(t) = (1 - \cos(2\omega_L t)) \frac{(\mathbf{B}_0 \mathbf{n}) \mathbf{B}_0}{|\mathbf{B}_0|^2} + \mathbf{n} \cos(2\omega_L t) - \frac{[\mathbf{B}_0 \times \mathbf{n}]}{|\mathbf{B}_0|} \sin(2\omega_L t), \quad (4)$$

$\omega_L = eB_0/2mc$ – частота ларморовской прецессии электрона, $\mathbf{n}$ – единичный вектор направления магнитного момента при $t = 0$.

1. Расчет спин-спиновой обменной корреляционной функции. Найдем обменные функции $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, $\mathbf{m}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ и $\mathbf{h}^{\alpha\gamma\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$. Из формулы (I-29) с учетом тождественности частиц имеем

$$\begin{aligned} M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= N(N-1) \sum_{\nu, \nu'} \sum_{S_{N-2}} \int dR_{N-2} \mu_B^2 \varphi^*(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2}; t) \times \\ &\times (\hat{\sigma}_1^{\alpha} \hat{\sigma}_2^{\beta} \varphi)(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2}; t) = \\ &= \sum_{\nu, \nu'} \frac{1}{2} (I_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) + \overline{I_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)), \end{aligned} \quad (5)$$

где черта над тензором $I_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}$ означает комплексное сопряжение, $R_{N-2} = d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N$, $\sum_{S_{N-2}} = \sum_{s_3, \dots, s_N}$. Для введенного в (5) комплексного тензора второго ранга имеем

$$\begin{aligned} I_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= N(N-1) \sum_{S_{N-2}} \int dR_{N-2} \frac{\mu_B^2}{2} \left\{ \varphi^*(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2}; t) \times \right. \\ &\times (\hat{\sigma}_1^{\alpha} \hat{\sigma}_2^{\beta} \varphi)(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2}; t) + \\ &\left. + (\hat{\sigma}_2^{\beta} \varphi)^*(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2}; t) (\hat{\sigma}_1^{\alpha} \varphi)(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2}; t) \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

Подставляя волновую функцию (I-39) в (6), где в качестве одночастичных функций φ_f взяты решения уравнения (1), а также воспользовавшись двойным разложением детерминанта Слейтера

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}, \omega; \mathbf{r}', \omega'; R_{N-2}, S_{N-2} | n_1, n_2, \dots; t \rangle &= \sum_f \sum_{f' < f} \sqrt{\frac{n_f}{N}} \sqrt{\frac{n_{f'}}{N-1}} (-1)^{\sum_{f' \leq g < f} n_g} \times \\ &\times (\langle \mathbf{r}, \omega | f; t \rangle \langle \mathbf{r}', \omega' | f'; t \rangle - \langle \mathbf{r}', \omega' | f; t \rangle \langle \mathbf{r}, \omega | f'; t \rangle) \times \\ &\times \langle R_{N-2}, S_{N-2} | n_1, \dots, (n_{f'} - 1), \dots, (n_f - 1), \dots; t \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

приходим к следующему выражению:

$$I_{\nu\nu'}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\mu_B^2 \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} \left(\langle f; t | \mathbf{r}, \nu \rangle \langle f'; t | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha | f; t \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | \hat{\sigma}^\beta | f'; t \rangle + \right. \\ \left. + \langle f; t | \mathbf{r}, \nu \rangle \langle f' | \sigma^\beta | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha | f; t \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | f'; t \rangle - \right. \\ \left. - \langle f; t | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle f'; t | \mathbf{r}, \nu \rangle \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha | f; t \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | \hat{\sigma}^\beta | f'; t \rangle - \right. \\ \left. - \langle f; t | \hat{\sigma}^\beta | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle f'; t | \mathbf{r}, \nu \rangle \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha | f; t \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | f'; t \rangle \right).$$

Выражение, стоящее в круглых скобках, обращается в нуль при $f = f'$, поэтому сумму можно распространить также на случай $f = f'$:

$$I_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{1}{2} \left(I_\nu^\alpha(\mathbf{r}, t) I_{\nu'}^\beta(\mathbf{r}', t) + I_\nu^\alpha(\mathbf{r}, t) \overline{I_{\nu'}^\beta(\mathbf{r}', t)} \right) - \\ - \frac{1}{2} \sum_f n_f \mu_B \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha | f; t \rangle \langle f; t | \mathbf{r}', \nu' \rangle \sum_{f'} n_{f'} \mu_B \langle \mathbf{r}', \nu' | \hat{\sigma}^\beta | f'; t \rangle \langle f'; t | \mathbf{r}, \nu \rangle - \\ - \frac{1}{2} \sum_f n_f \mu_B^2 \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha | f; t \rangle \langle f; t | \hat{\sigma}^\beta | \mathbf{r}', \nu' \rangle \sum_{f'} n_{f'} \langle \mathbf{r}', \nu' | f'; t \rangle \langle f'; t | \mathbf{r}, \nu \rangle, \quad (8)$$

где

$$I_\nu^\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_f \mu_B n_f \langle f; t | \mathbf{r}, \nu \rangle \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha | f; t \rangle, \\ M_\nu^\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} (I_\nu^\alpha(\mathbf{r}, t) + \overline{I_\nu^\alpha(\mathbf{r}, t)}).$$

Подставляя полученное выражение (8) в (5), получаем двухчастичный тензор плотности магнитного момента

$$M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{\nu, \nu'} M_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t), \\ M_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = M_\nu^\alpha(\mathbf{r}, t) M_{\nu'}^\beta(\mathbf{r}', t) + \mathbf{m}_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t), \\ \mathbf{m}_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -\frac{1}{4}\mu_B^2 \left(\langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha \hat{\rho}(t) | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | \hat{\sigma}^\beta \hat{\rho}(t) | \mathbf{r}, \nu \rangle + \right. \\ \left. + \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\rho}(t) \hat{\sigma}^\beta | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | \hat{\rho}(t) \hat{\sigma}^\alpha | \mathbf{r}, \nu \rangle + \right. \\ \left. + \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^\alpha \hat{\rho}(t) \hat{\sigma}^\beta | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | \hat{\rho}(t) | \mathbf{r}, \nu \rangle + \right. \\ \left. + \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\rho}(t) | \mathbf{r}', \nu' \rangle \langle \mathbf{r}', \nu' | \hat{\sigma}^\beta \hat{\rho}(t) \hat{\sigma}^\alpha | \mathbf{r}, \nu \rangle \right), \quad (9)$$

где $\hat{\rho}(t)$ — одночастичная матрица плотности, которая имеет вид

$$\hat{\rho}(t) = \sum_f n_f |f; t\rangle \langle f; t|.$$

Таким образом, мы получили выражение для спин-спиновой обменной корреляционной функции $\mathbf{m}_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ (9) для произвольных одночастичных волновых функций $|f; t\rangle$.

Выбирая в качестве нулевой итерации те или иные одночастичные волновые функции, мы получим уравнения квантовой гидродинамики для конкретных физических систем (кристаллов, атомов и т.п.). Например, используя одночастичные функции Блоха, мы получим уравнения для систем с периодической пространственной структурой, в частности для кристаллов. Однако каждый кристалл обладает своей группой симметрий. Поэтому, подбирая волновые функции инвариантными относительно соответствующей группы преобразований, мы можем получить модель того или иного конкретного кристалла.

Так как одночастичный волновой вектор равен

$$\langle \mathbf{r}, \nu | \mathbf{p}, \sigma \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{\mathbf{p}} t - (\mathbf{p} \mathbf{r})) \right\} w_{\sigma}(\nu, t), \quad (10)$$

то, суммируя по индексам ν и ν' , получаем из (9)

$$\begin{aligned} m^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \sum_{\nu, \nu'} m_{\nu\nu'}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -\frac{1}{2} \mu_B^2 \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \times \\ &\times \left(\exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \text{Tr}(\hat{\sigma}^{\alpha} \hat{\rho}_{\sigma}(t) \hat{\sigma}^{\beta} \hat{\rho}_{\sigma'}(t)) + \right. \\ &\left. + \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \text{Tr}(\hat{\sigma}^{\beta} \hat{\rho}_{\sigma}(t) \hat{\sigma}^{\alpha} \hat{\rho}_{\sigma'}(t)) \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Используя перестановочные свойства матриц Паули и формулу (3), находим

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{\sigma}^{\alpha} \hat{\rho}_{\sigma}(t) \hat{\sigma}^{\beta} \hat{\rho}_{\sigma'}(t)) &= \frac{1}{2} \delta^{\alpha\beta} + \frac{1}{4} f^{\mu}(t) \text{Tr}(\sigma(\hat{\sigma}^{\alpha} \hat{\sigma}^{\mu} \hat{\sigma}^{\beta}) + \sigma'(\hat{\sigma}^{\alpha} \hat{\sigma}^{\beta} \hat{\sigma}^{\mu})) + \\ &+ \frac{1}{4} \sigma \sigma' f^{\mu}(t) f^{\nu}(t) \text{Tr}(\hat{\sigma}^{\alpha} \hat{\sigma}^{\mu} \hat{\sigma}^{\beta} \hat{\sigma}^{\nu}) = \\ &= \frac{1}{2} \delta^{\alpha\beta} (1 - \sigma \sigma') + \frac{1}{2} i f^{\mu}(t) \varepsilon^{\alpha\mu\beta} (\sigma - \sigma') + \sigma \sigma' f^{\alpha}(t) f^{\beta}(t). \end{aligned}$$

Подставляя полученное выражение в формулу (11) и одновременно заменяя сумму по импульсам интегрированием, находим плотность обменной энергии спин-спинового взаимодействия:

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_{\text{spin}}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' G^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') m^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \frac{1}{2} \mu_B^2 \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} G^{\alpha\beta}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \text{Tr}(\hat{\sigma}^{\alpha} \hat{\rho}_{\sigma}(t) \hat{\sigma}^{\beta} \hat{\rho}_{\sigma'}(t)) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \frac{1}{4} \mu_B^2 \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \times \\ &\times ((1 - \sigma \sigma') G^{\alpha\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + 2\sigma \sigma' f^{\alpha}(t) f^{\beta}(t) G^{\alpha\beta}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')). \end{aligned}$$

Здесь нами учтена симметрия тензора $G^{\alpha\beta}$ относительно перестановки индексов. Теперь используем формулу (I-7) для функции Грина спин-спинового взаимодействия в

фурье-представлении и получим

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_{\text{spin}}(\mathbf{r}, t) = 2\pi\mu_B^2 n^2 - 2\pi\mu_B^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' (n_{\mathbf{p},+1} - n_{\mathbf{p},-1}) \times \\ \times (n_{\mathbf{p}',+1} - n_{\mathbf{p}',-1}) \frac{((\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{f}(t))}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Поскольку интегрирование в (12) происходит при фиксированном времени, то выберем ось z системы координат таким образом, что $\mathbf{f} = \mathbf{e}_z$. А так как область интегрирования сферически-симметрична, то окончательно получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_{\text{spin}}(\mathbf{r}, t) = 2\pi\mu_B^2 n^2 - 2\pi\mu_B^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \frac{1}{3} (n_{\mathbf{p},+1} - n_{\mathbf{p},-1}) (n_{\mathbf{p}',+1} - n_{\mathbf{p}',-1}) = \\ = 2\pi\mu_B^2 n(\mathbf{r}, t) - \frac{2\pi}{3} \mathbf{M}^2(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (13)$$

Выражение (13) получено на основании корректного гамильтониана спин-спинового взаимодействия и, как видно, всегда положительно, в то время как обменная энергия, рассчитанная на основе общепринятого гамильтониана (I-1), равна

$$\tilde{\varepsilon}'_{\text{spin}} = -2\pi\mu_B^2 n_+ n_- - \frac{2\pi}{3} \mu_B^2 (n_+ - n_-)^2$$

и, как легко видеть, отрицательно определена ($n_{\pm}$ — плотность электронов с ориентациями спинов вдоль (против) вектора $\mathbf{f}$).

Полученное выражение для плотности обменной энергии спин-спинового взаимодействия позволяет найти плотности силы обменного взаимодействия спинов, входящую в уравнение баланса импульса (I-42):

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{spin}}^{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \nabla^{\alpha} G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{m}^{\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \\ = \nabla^{\alpha} \left(\int d\mathbf{r}' G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{m}^{\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \right) - \int d\mathbf{r}' G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla^{\alpha} \mathbf{m}^{\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \\ = 2\nabla^{\alpha} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{r}, t) - \int d\mathbf{r}' G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mu_B^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \times \\ \times \frac{1}{2} (\delta^{\alpha\beta} (1 - \sigma\sigma' \mathbf{f}^2(t)) + 2\sigma\sigma' f^{\alpha}(t) f^{\beta}(t)) \frac{p^{\alpha} - p'^{\alpha}}{\hbar} \sin \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\hbar}. \end{aligned}$$

Если система неограниченная, то второе слагаемое равно нулю, так как $G^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — четная функция, т.е. $G^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = G^{\alpha\beta}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$, и она интегрируется по неограниченному пространству с нечетной функцией $\sin[(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar]$. В результате получаем

$$\mathcal{F}_{\text{spin}}^{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \nabla^{\alpha} G^{\beta\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{m}^{\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -2\nabla^{\alpha} \tilde{\varepsilon}_{\text{spin}}(\mathbf{r}, t). \quad (14)$$

2. Обменный вклад в уравнение Блоха. Полученное выражение для обменной спин-спиновой корреляционной функции позволяет найти обменный вклад в уравнение

Блоха. Из формулы (I-43) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^\alpha(\mathbf{r}, t) &= \frac{e}{mc} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \int d\mathbf{r}' G^{\gamma\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{m}^{\beta\delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \\ &= -\frac{e}{mc} \mu_B^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \times \\ &\quad \times \sigma \sigma' \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} f^\beta(t) G^{\gamma\delta}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') f^\delta(t). \end{aligned}$$

В результате приходим к формуле

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \frac{e}{mc} \mu_B^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \times \\ &\quad \times 4\pi \sigma \sigma' \frac{[\mathbf{f} \times (\mathbf{p} - \mathbf{p}')]}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} (\mathbf{f} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}')). \end{aligned} \quad (15)$$

Так как величина $n_{\mathbf{p}, \sigma}$ не зависит от направления вектора $\mathbf{p}$, то

$$\int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \frac{(p^\gamma - p'^\gamma)(p^\mu - p'^\mu)}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \sim \delta^{\gamma\mu}.$$

Поэтому интеграл в (15) равен нулю:

$$\mathbf{B}^\alpha(\mathbf{r}, t) \sim \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} f^\beta f^\mu \delta^{\gamma\mu} = 0. \quad (16)$$

Таким образом, в рамках рассматриваемого приближения, когда в качестве нулевой итерации выбраны одночастичные волновые функции (10), обменное спин-спиновое взаимодействие не дает вклада в уравнение баланса плотности магнитного момента (I-42).

3. Кулоновские обменные корреляции. Рассмотрим двухчастичную плотность вероятности

$$n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{\nu, \nu'} n_{\nu\nu'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t),$$

где

$$\begin{aligned} n_{\nu\nu'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= N(N-1) \sum_{S_{N-2}} \int dR_{N-2} \langle n_1, n_2, \dots; t | \mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2} \rangle \times \\ &\quad \times \langle \mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu'; R_{N-2}, S_{N-2} | n_1, n_2, \dots; t \rangle. \end{aligned}$$

Используя разложение (7), получаем

$$n_{\nu\nu'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = n_\nu(\mathbf{r}, t) n_{\nu'}(\mathbf{r}', t) - |\langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\rho}(t) | \mathbf{r}', \nu' \rangle|^2.$$

Отсюда легко видеть, что

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= - \sum_{\nu, \nu'} |\langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\rho}(t) | \mathbf{r}', \nu' \rangle|^2 = \\ &= - \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right\} \text{Tr}(\hat{\rho}_\sigma(t) \hat{\rho}_{\sigma'}(t)), \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_\sigma(t)\hat{\rho}_{\sigma'}(t)) = \frac{1}{4} \mathrm{Tr}(1 + (\sigma + \sigma')(\hat{\sigma}\mathbf{f}(t)) + \sigma\sigma'\mathbf{f}^2(t)) = \frac{1}{2}(1 + \sigma\sigma').$$

Обменная энергия кулоновского взаимодействия была получена Дираком. Приведем окончательный результат для плотности обменной энергии кулоновского взаимодействия:

$$\tilde{\varepsilon}_c(\mathbf{r}, t) = -2\pi e^2 \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{4}{3}} \left\{ \left(n + \frac{2mc}{|e|\hbar} |\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)|\right)^{\frac{4}{3}} + \left(n - \frac{2mc}{|e|\hbar} |\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)|\right)^{\frac{4}{3}} \right\}. \quad (18)$$

Формула (18) при $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = 0$ получена в работе Киржница [2] (см. также [3]–[5]).

Плотность силы обменного кулоновского взаимодействия равна

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_c^\alpha(\mathbf{r}, t) &= - \int d\mathbf{r}' e^2 \nabla^\alpha G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') g_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \\ &= -\nabla^\alpha \left(\int d\mathbf{r}' e^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') g_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \right) + \int d\mathbf{r}' e^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla^\alpha g_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \\ &= -2\nabla^\alpha \tilde{\varepsilon}_c - \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{p}' \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{p}, \sigma} n_{\mathbf{p}', \sigma'} \frac{i}{\hbar} (p^\alpha - p'^\alpha) e^2 G(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \times \\ &\quad \times \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_\sigma(t)\hat{\rho}_{\sigma'}(t)) = -2\nabla^\alpha \tilde{\varepsilon}_c(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (19)$$

в силу того что интегрирование по импульсам ведется во всем пространстве и функция Грина оператора Лапласа – четная функция.

4. Явный вид тензора давления. Для замыкания уравнений баланса необходимо получить явный вид тензора давления. Тензор кинетического давления $p^{\alpha\beta}$ определяется формулой (I-26), в которой волновая функция $\Psi_S(R, t)$ заменена на $\varphi_S(R, t)$ из соотношения (I-32). С учетом тождественности частиц имеем из (I-26) и (I-39)

$$\begin{aligned} p^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) &= \sum_\nu N \sum_{S_{N-1}} \int dR_{N-1} \frac{1}{4m} \{ D^{\beta*} \langle n_1, n_2, \dots; t | \mathbf{r}, \nu; R_{N-1}, S_{N-1} \rangle \times \\ &\quad \times D^\alpha \langle \mathbf{r}, \nu; R_{N-1}, S_{N-1} | n_1, n_2, \dots; t \rangle + \\ &\quad + \langle n_1, n_2, \dots; t | \mathbf{r}, \nu; R_{N-1}, S_{N-1} \rangle \times \\ &\quad \times D^\beta D^\alpha \langle \mathbf{r}, \nu; R_{N-1}, S_{N-1} | n_1, n_2, \dots; t \rangle + \text{к.с.} \}. \end{aligned} \quad (20)$$

Воспользуемся разложением детерминанта Слейтера по одной из строк:

$$\begin{aligned} p^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{V} \sum_\nu \sum_f n_f \frac{1}{4m} (D^{\beta*} \langle f; t | \mathbf{r}, \nu \rangle D^\alpha \langle \mathbf{r}, \nu | f; t \rangle + \\ &\quad + \langle f; t | \mathbf{r}, \nu \rangle D^\beta D^\alpha \langle \mathbf{r}, \nu | f; t \rangle + \text{к.с.}). \end{aligned} \quad (21)$$

Выражение для тензора давления (21) получено для произвольных одночастичных волновых функций $\langle \mathbf{r}, \nu | f; t \rangle$. Поэтому, выбирая одночастичную волновую функцию определенным образом, т.е. учитывая индивидуальные свойства рассматриваемой системы, можно получить то или иное уравнение состояния, пригодное для описания конкретной

системы, например кристалла, ядра атома и т.п. В частности, для систем с большой плотностью электронов в качестве нулевой итерации можно взять волновые функции в виде плоских волн (10). Подставляя в (21) одночастичные волновые функции (10), приходим к следующему выражению для кинетического давления:

$$p^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \sum_{\nu} n_{\mathbf{p},\nu} \frac{1}{m} p^{\alpha} p^{\beta} = \delta^{\alpha\beta} p_F(\mathbf{r}, t), \quad (22)$$

где

$$p_F(\mathbf{r}, t) = \frac{(2\pi\hbar)^2}{10m} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \left\{ \left(n + \frac{2mc}{|e|\hbar} |\mathbf{M}| \right)^{\frac{5}{3}} + \left(n - \frac{2mc}{|e|\hbar} |\mathbf{M}| \right)^{\frac{5}{3}} \right\} \quad (23)$$

– давление Ферми. Как легко видеть, полученная из уравнения Шредингера формула для тензора давления при $\mathbf{M} = 0$ дает давление Ферми при нулевой температуре.

В уравнение баланса магнитного момента (I-43) входит плотность потока магнитного момента $j_M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)$. Действуя так же, как и в предыдущих случаях, получаем, что

$$j_M^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\nu} \sum_f n_f \frac{1}{4m} \{ \langle f; t | \mathbf{r}, \nu \rangle D^{\beta} \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^{\alpha} | f; t \rangle + \\ + D^{\beta*} \langle f; t | \mathbf{r}, \nu \rangle \langle \mathbf{r}, \nu | \hat{\sigma}^{\alpha} | f; t \rangle \} = 0, \quad (24)$$

поскольку в рассматриваемом приближении импульс и собственный магнитный момент электрона оказываются нескоррелированными.

Суммируя результаты, полученные в (13), (14), (16), (18), (19), (23) и (24), окончательно получаем

$$mn(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \nabla \right) v^{\alpha}(\mathbf{r}, t) + \nabla^{\alpha} \tilde{p}(\mathbf{r}, t) = \\ = en(\mathbf{r}, t) \left(E^{\alpha}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} v^{\beta}(\mathbf{r}, t) B^{\gamma}(\mathbf{r}, t) \right) + M^{\beta}(\mathbf{r}, t) \nabla^{\alpha} B^{\beta}(\mathbf{r}, t), \quad (25)$$

$$\frac{\partial M^{\alpha}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla^{\beta} (v^{\beta}(\mathbf{r}, t) M^{\alpha}(\mathbf{r}, t)) = \frac{e}{mc} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} M^{\beta}(\mathbf{r}, t) B^{\gamma}(\mathbf{r}, t). \quad (26)$$

Здесь все обменное взаимодействие заключено в $\tilde{p}(\mathbf{r}, t)$, так что получаем для квантового давления соотношение

$$\tilde{p} = p_F + 2\tilde{\varepsilon}_c + 2\tilde{\varepsilon}_{\text{spin}}, \quad (27)$$

где $\tilde{\varepsilon}_{\text{spin}}$ и $\tilde{\varepsilon}_c$ получены выше (см. (13) и (18)). Уравнения (25) и (26) рассматриваются совместно с уравнениями поля (I-44).

5. Многоэлектронный атом. Рассмотрим задачу о многоэлектронном атоме с зарядом ядра, равным Ze ($e > 0$). Магнитное поле предполагается равным нулю. Плотность собственных магнитных моментов электронов, если заполнены все нижние энергетические уровни, отлична от нуля лишь на внешней оболочке атома, и для многоэлектронного атома ею можно пренебречь. В нестационарном случае многоэлектронный атом

описывается системой уравнений (25), (26) и уравнением непрерывности, которые в сферической системе координат имеют вид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 n v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (n v_\theta \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} (n v_\varphi) = 0, \\ & mn \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{v_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{v_\theta^2 + v_\varphi^2}{r} \right) + \frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} = en \frac{\partial \Phi}{\partial r}, \\ & mn \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} + \frac{v_r v_\theta}{r} - \frac{v_\varphi^2}{r} \operatorname{ctg} \theta \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \theta} = en \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta}, \\ & mn \left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \theta} + \frac{v_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{v_r v_\varphi}{r} + \frac{v_\theta v_\varphi}{r} \operatorname{ctg} \theta \right) + \\ & + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \varphi} = en \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (28)$$

Потенциал $\Phi(r, \theta, \varphi)$ электрического поля атома удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right) = -eZ\delta(r) + 4\pi enr^2. \quad (29)$$

Будем искать стационарные осесимметричные решения. Выбирая систему координат таким образом, чтобы ось z являлась осью симметрии, и полагая, что $v_\theta = 0$, получаем уравнение непрерывности из системы уравнений (28) в виде

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 n v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} (n v_\varphi) = 0.$$

Так как система обладает осью симметрии, то производная по переменной φ от любой из полевых функций равна нулю. Отсюда сразу получаем

$$v_r(r, \theta) = \frac{f_r(\theta)}{r^2 n(r, \theta)}, \quad (30)$$

а уравнения (28) принимают вид

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{m v_r^2}{2} + w - e\Phi \right) = \frac{m v_\varphi^2}{r}, \quad (31)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (w - e\Phi) = \frac{m v_\varphi^2}{r} \operatorname{ctg} \theta, \quad (32)$$

$$v_r \left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r} \right) = 0, \quad (33)$$

где величина w определена соотношением

$$\nabla^\alpha \tilde{p}(r, \theta) = n(r, \theta) \nabla^\alpha w(r, \theta)$$

и имеет вид

$$w = an^{\frac{2}{3}} - bn^{\frac{1}{3}} + cn, \quad (34)$$

$$a = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad b = 32\pi e^2 \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{4}{3}}, \quad c = 8\pi\mu_B^2. \quad (35)$$

Уравнение (33) имеет два решения, одно из которых $v_r = 0$. Интегрируя это уравнение в случае $v_r \neq 0$, получаем, что φ -компонента гидродинамической скорости равна

$$v_\varphi(r, \theta) = \frac{f_\varphi(\theta)}{r}. \quad (36)$$

Подставляя (36) и (30) в (31) и (32), приходим к следующей системе:

$$\begin{aligned} \frac{mf_r^2(\theta)}{2r^4n^2} + w(r, \theta) - e\Phi(r, \theta) + \frac{mf_\varphi^2(\theta)}{2r^2} &= C(\theta), \\ w(r, \theta) - e\Phi(r, \theta) &= \frac{D(\theta)}{r^2}, \\ D'(\theta) &= mf_\varphi^2(\theta) \operatorname{ctg} \theta. \end{aligned} \quad (37)$$

Функции $f_r(\theta)$, $f_\varphi(\theta)$, $C(\theta)$ и $D(\theta)$ определяются из системы уравнений (37). Из системы (37) легко получить выражение для плотности электронов:

$$n(r, \theta) = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{r} \frac{|f_r(\theta)|}{\sqrt{C(\theta)r^2 - D(\theta) - \frac{mf_\varphi^2(\theta)}{2}}}. \quad (38)$$

Покажем, что полученное выражение приводит к неправильному результату для числа электронов. Действительно, интеграл от (38) по всему объему, занимаемому системой, должен быть конечным и равным числу электронов в атоме. Но число электронов в атоме, вычисленное на основании формулы (38), равно

$$N = 2\pi \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^\pi \sin \theta d\theta |f_r(\theta)| \int_0^\infty \frac{r dr}{\sqrt{C(\theta)r^2 - D(\theta) - \frac{mf_\varphi^2(\theta)}{2}}}.$$

Легко видеть, что этот интеграл расходится. Следовательно, $v_r = 0$. С учетом этого результата получаем из (31)–(33)

$$\left(r \frac{\partial}{\partial r} - \operatorname{tg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (w - e\Phi) = 0.$$

Переменные r и θ в этом уравнении разделяются, т.е.

$$w(r, \theta) - e\Phi(r, \theta) = R(r)T(\theta) - e\Phi_0,$$

где функции $R(r)$ и $T(\theta)$ удовлетворяют уравнениям

$$\frac{r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} = \frac{\operatorname{tg} \theta}{T(\theta)} \frac{dT(\theta)}{d\theta} = k,$$

Φ_0 – значение потенциала $\Phi(r, \theta)$ на бесконечности, k – константа, определяемая из граничных условий. Интегрируя эти уравнения, находим $R(r)$ и $T(\theta)$:

$$R(r) = A_1 r^k, \quad T(\theta) = A_2 \sin^k \theta.$$

Отсюда получаем следующий интеграл уравнений (31)–(33):

$$w(r, \theta) - e\Phi(r, \theta) = Ar^k \sin^k \theta - e\Phi_0. \quad (39)$$

Так как плотность электронов и потенциал $\Phi(r, \theta)$ быстро спадают при $r \rightarrow \infty$, то $k < 0$ в уравнении (39). С другой стороны, подставляя (39) в уравнение (31), находим, что

$$\frac{mv_\varphi^2}{r} = -Akr^{k-1} \sin^k \theta.$$

Так как $k < 0$, а в правой части уравнения стоит положительная величина, то $A > 0$, а поскольку входящий в правую часть этого уравнения $\sin \theta$ принимает как положительные, так и отрицательные значения, то выражение, стоящее справа, принимает положительные значения только при четных k . Таким образом, $k = -2f$, где $f = 0, 1, \dots$. Полагая на бесконечности потенциал равным нулю, окончательно получаем выражения для скорости v_φ и интеграла (39) уравнений (31)–(33):

$$\frac{mv_\varphi^2}{r} = 2Af r^{-(2f+1)} \sin^{-2f} \theta, \quad (40)$$

$$an^{\frac{2}{3}} - bn^{\frac{1}{3}} + cn - e\Phi(r, \theta) + \frac{A}{r^{2f}} \sin^{-2f} \theta = 0. \quad (41)$$

Величина (40) имеет смысл удельного момента количества движения электрона. Как видно из (40), условия на границе системы приводят к дискретному спектру этой величины. Выражение в правой части (40) обращается в бесконечность при $\theta = 0, \pi$. Однако этот факт не должен приводить к противоречиям, так как при расчете интегральных характеристик системы (полной энергии системы, полного момента импульса и т.п.) гидродинамическая скорость $v_\varphi(r, \theta)$ входит в виде произведения с плотностью электронов $n(r, \theta)$. Например, момент количества движения атома определяется формулой

$$\begin{aligned} L_\varphi(A, f) &= 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr \frac{mv_\varphi^2}{r} = \\ &= 4\pi Af \int_0^\pi (\sin \theta)^{-2f+1} d\theta \int_0^\infty r^{-2f+1} dr n(r, \theta). \end{aligned} \quad (42)$$

Условие отсутствия особенностей в nv_φ можно рассматривать как одно из условий, накладываемых на плотность $n(r, \theta)$ при решении рассматриваемой задачи.

Несмотря на то что левая часть уравнения (41) является интегралом уравнений квантовой гидродинамики и по своему виду и размерности напоминает удельную энергию электрона в атоме, она таковой не является. В действительности плотность энергии системы с учетом поступательной энергии имеет вид

$$\varepsilon = \frac{3}{2}p_F + \tilde{\varepsilon}_c + \tilde{\varepsilon}_{\text{spin}} - \frac{1}{2}en\Phi + \frac{mv_\varphi^2}{2}n - \frac{1}{2}en\frac{Z}{r}. \quad (43)$$

С другой стороны, сравнивая выражения (13), (18), (23) с (34), легко получить следующие соотношения:

$$\frac{3}{2}p_F = \frac{15}{2}an^{\frac{5}{3}}, \quad \tilde{\varepsilon}_c = -\frac{1}{8}bn^{\frac{4}{3}}, \quad \tilde{\varepsilon}_{\text{spin}} = \frac{1}{4}cn^2. \quad (44)$$

В результате удельная энергия электрона равна

$$\epsilon(r, \theta) = \frac{15}{2} a n^{\frac{2}{3}} - \frac{1}{8} n^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{2} c n + \frac{A f}{r^{2f}} \sin^{-2f} \theta - \frac{1}{2} e \Phi(r, \theta) - \frac{1}{2} \frac{e Z}{r}. \quad (45)$$

Используя выражение для интеграла (39), можно понизить степень концентрации $n(r, \theta)$ в формуле (45):

$$\epsilon(r, \theta) = \frac{59}{8} b n^{\frac{1}{3}} - 7 c n - \frac{13}{2} \frac{A f}{r^{2f}} \sin^{-2f} \theta + \frac{13}{2} e \Phi(r, \theta) - \frac{1}{2} \frac{e Z}{r}. \quad (46)$$

Тогда полная энергия системы оказывается равной

$$E(A, f) = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty r^2 dr n(r, \theta) \left(\frac{59}{8} b n^{\frac{1}{3}}(r, \theta) - 7 c n(r, \theta) - \frac{13}{2} \frac{A f}{r^{2f}} \sin^{-2f} \theta + 7 e \Phi(r, \theta) - \frac{1}{2} \frac{e Z}{r} \right). \quad (47)$$

Уравнение (41) рассматривается совместно с уравнением для потенциала электрического поля $\Phi(r, \theta)$ (29). Удобно ввести вспомогательную функцию $\tilde{\Phi}$, связанную с Φ следующим соотношением:

$$\Phi(r, \theta) = \frac{e Z}{r} + \frac{A/e}{r^{2f}} \sin^{-2f} \theta + \tilde{\Phi}(r, \theta).$$

Тогда уравнения (41) и (29) примут вид

$$a n^{\frac{2}{3}} - b n^{\frac{1}{3}} + c n - e \tilde{\Phi}(r, \theta) - \frac{e^2 Z}{r} = 0, \quad (48)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \theta} \right) = -(2f)^2 \frac{A/e}{r^{2f}} \sin^{-2(f+1)} \theta + 4\pi e r^2 n. \quad (49)$$

Система уравнений (48), (49) содержит модель Томаса–Ферми–Дирака для основного состояния атома. Действительно, в основном состоянии, когда $f = 0$, учет граничных условий приводит к необходимости положить $A = 0$ и мы приходим к модели Томаса–Ферми–Дирака многоэлектронного атома с той разницей, что в полученных нами уравнениях учтена обменная энергия спин-спинового взаимодействия, рассчитанная в данной работе на основании корректного гамильтониана спин-спиновых взаимодействий (I-9).

В заключение произведем оценку вклада обменного спин-спинового взаимодействия в энергию многоэлектронного атома, сравнив ее с обменной энергией кулоновского взаимодействия. Найдем концентрацию электронов, при которой плотности обменных энергий спин-спинового и кулоновского взаимодействий становятся равными, т.е. $|\tilde{\epsilon}_c| = |\tilde{\epsilon}_{\text{spin}}|$. В этом случае из (44) сразу получаем

$$n = \left(\frac{b}{2c} \right)^{\frac{3}{2}}$$

и после подстановки b и c (см. (35)) находим

$$n = \frac{1}{8^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{3}{\pi} \right)^2 \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^3 \approx 0.332 \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^3 \approx 14.4 \cdot 10^{28} \text{ см}^{-3}.$$

Таким образом, при электронной концентрации порядка 10^{28} см^{-3} плотности обменных энергий кулоновского и спин-спинового взаимодействий практически совпадают. При дальнейшем росте концентрации электронов плотность обменной энергии спин-спинового взаимодействия становится больше плотности обменной энергии кулоновского взаимодействия, так как последняя растет медленнее с ростом концентрации, как это видно из (44).

Плотность электронов в атоме можно оценить следующим образом:

$$n \approx \frac{Z}{\frac{4}{3}\pi r_a^3},$$

где r_a — радиус атома, Z — число электронов в атоме. Поскольку радиус атома порядка 10^{-8} см , то плотность электронов в атоме имеет порядок $n \sim Z \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$. Для атома железа, например, эта концентрация имеет порядок 10^{26} см^{-3} .

Простота описания линейных кинетических свойств бесстолкновительной квантовой плазмы с самосогласованным полем с помощью квантовых гидродинамических уравнений показана в работе [6].

Список литературы

- [1] Л. С. Кузьменков, С. Г. Максимов, В. В. Федосеев. ТМФ. 2001. Т. 126. № 1. С. 136.
- [2] Д. А. Киржниц. ЖЭТФ. 1957. Т. 32. № 1. С. 115.
- [3] M. Gell-Mann, K. A. Breuckner. Phys. Rev. 1957. V. 106. P. 364.
- [4] M. Gell-Mann. Phys. Rev. 1957. V. 106. P. 369.
- [5] А. С. Компанеев. ЖЭТФ. 1956. Т. 31. № 5. С. 876.
- [6] М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе. УФН. 1999. Т. 169. № 6. С. 687.

Поступила в редакцию 22.VI.2000 г.