

Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

N. N. Kalitkin, L. V. Kuzmina, G. V. Shpatakovskaya,
Квазиклассическая модель атома,
TVT, 1977, Volume 15, Issue 1, 186–188

<https://www.mathnet.ru/eng/tvt8121>

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you
have read and agreed to these terms of use
<https://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.9.168

May 21, 2025, 02:43:13



КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.182

КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТОМА *

Н. Н. Балиткин, Л. В. Кузьмина, Г. В. Шпатаковская

1. Уравнение состояния сильно сжатого или сильно нагретого вещества описывается квазиклассической моделью Томаса – Ферми (ТФ). Но при понижении температуры и плотности точность этой модели оказывается недостаточной.

К модели ТФ предложены поправки, также имеющие квазиклассическую природу и расширяющие область ее применимости. Одни – квантовообменные поправки – уточняют среднее значение электронной плотности в различных участках атома. Другие – осцилляционные поправки – позволяют описать немонокотонную зависимость распределения плотности электронов $\rho_e(r)$, связанную с оболочечной структурой атома.

Модель ТФ с указанными поправками будем называть квазиклассической моделью атома (КМА). Остановимся на ней подробнее (библиографию см. в [1]).

2. Модель ТФ соответствует простейшему варианту квазиклассического приближения к модели Хартри – Фока (ХФ). При этом в объеме атомной ячейки рассматривается газ электронов, взаимодействующих между собой и с ядром. Плотность этого газа в фазовом пространстве определяется фермиевским распределением

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{2}{1 + \exp(E(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \mu/T)}, \quad E = \frac{1}{2} p^2 + V(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь E – энергия электрона; μ – химический потенциал. Самосогласованный атомный потенциал $V(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\Delta V = -4\pi\rho(\mathbf{r}), \quad \rho(\mathbf{r}) = \int \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (2)$$

Решение этого уравнения, которое легко выполняется численными методами, позволяет определить атомный потенциал, а по нему – все термодинамические функции вещества.

Отметим две особенности модели ТФ. Одна – это наличие подобия по заряду Z . Поэтому достаточно произвести численные расчеты всех свойств водорода ($Z=1$); свойства всех остальных элементов получаются соответствующим изменением масштабов. Вторая особенность – монотонная зависимость всех свойств вещества от Z .

3. Для учета эффектов обмена следует прибавить к энергии в (1) обменный потенциал Фока. Квантовые эффекты связаны с тем, что импульс в (1), (2) является оператором $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$, не коммутирующим с координатой \mathbf{r} . Учет этой некоммутации в низшем приближении дает квантовую поправку, которая по порядку величины равна обменной. При этом уравнения (1), (2) несколько усложняются, но по-прежнему не представляют трудностей для численного решения.

Квантовые и обменные поправки также подчиняются закону подобия по Z . Этот закон отличается от ТФ-закона подобия; тем не менее по-прежнему достаточно провести численный расчет только для $Z=1$.

Квантовообменные поправки монотонно зависят от Z . Поэтому они не позволяют описать ряд свойств вещества, связанных с оболочечной структурой и зависящих от Z нерегулярно. Однако они улучшают согласие с экспериментом в среднем и позволяют описать термодинамику вещества даже в области низкотемпературной плазмы с разумной точностью 10–20%.

4. Учет оболочечной структуры вещества возможен с помощью осцилляционной поправки. Рассмотрим квазиклассические радиальные волновые функции электро-

* Материалы настоящего сообщения доложены на научной сессии по вопросу «Исследования плотной плазмы», проведенной 8–9 июня 1976 г. секцией низкотемпературной плазмы Научного Совета АН СССР по комплексной проблеме «Теплофизика».

нов в ТФ-потенциале

$$\psi_n = \frac{C_n}{r\sqrt{p_n(r)}} \sin \left(S_n(r) + \frac{\pi}{4} \right), \quad (3)$$

где $S_n(r)$ — действие. Им соответствует электронная плотность

$$\rho(r) = 2 \sum_n |\psi_n|^2 = \sum_n \frac{C_n^2}{r^2 p_n(r)} [1 + \sin(2S_n(r))].$$

Единица в квадратных скобках приводит к ТФ-электронной плотности, а оставшаяся осциллирующая часть дает осцилляционную поправку к ней. Аналогичные поправки,

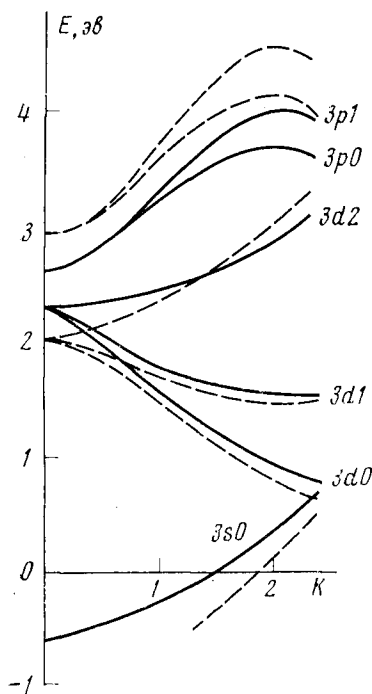


Рис. 1

Рис. 1. Энергетический спектр железа при $\rho/\rho_0=8,57$. Сплошные кривые — КМА; пунктир — зонная модель [2]; единицы атомные

Рис. 2. Уравнение состояния цезия. Сплошные линии — расчет по КМА при $-\lg p$ [г/см³]: 1 — 1,42; 2 — 2,42; 3 — 3,42; точки — расчет по уравнениям Саха; кружки — эксперимент [4]. Пунктирные линии соответствуют однократной и двукратной ионизации

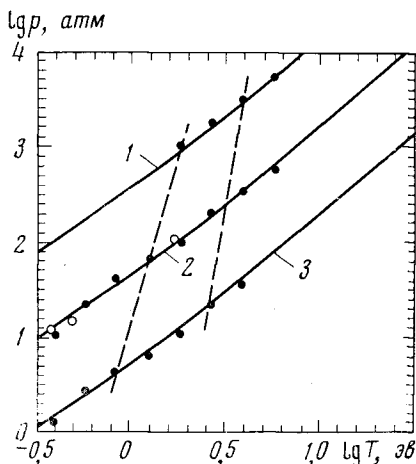


Рис. 2

немонотонно зависящие от Z , появляются во всех термодинамических величинах и позволяют выявить фазовые переходы, связанные со структурой электронных оболочек.

Если строить одноэлектронные волновые функции на основе функций (3), а на границе атомной ячейки поставить крайние условия Блоха, то можно описать зонную структуру электронного спектра твердых тел. Это существенно при описании как термодинамических, так и кинетических характеристик вещества.

5. Таким образом, КМА построена на основании чисто теоретических соображений, без привлечения полуэмпирических соотношений, и не содержит никаких «подгончных» констант. Сравнение с экспериментом или надежно апробированными моделями показывает, что КМА хорошо описывает широкий круг разнородных явлений в большом диапазоне температур и плотностей вещества.

Расчитанные по КМА профили электронной плотности внутри атома согласуются с моделью ХФ, а структура электронных спектров твердых тел — с зонной моделью [2] (рис. 1). Атомные формфакторы для рассеяния рентгеновских лучей и быстрых электронов на атомах совпадают с экспериментальными данными [3]. Уравнение состояния разреженной плазмы оказывается близким к расчетам по уравнениям Саха, а плотной неидеальной плазмы — к экспериментальным данным [4] (рис. 2). Разумно согласуются с экспериментами (см. обзор [5]) расчеты холодного и ударного сжатия твердых тел при давлениях в десятки млн. атм.

Таким образом, КМА единым образом (и при помощи несложного математического аппарата, удобного для численного расчета) описывает поведение вещества и,

в частности, его термодинамические свойства в очень широком диапазоне состояний — от плазмы до сжатого твердого тела.

Институт прикладной математики
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
28 VI 1976

ЛИТЕРАТУРА

1. Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик, Г. В. Шпагаковская. Успехи физ. наук, 117, 3, 1975.
2. А. И. Воронинов, Г. М. Гандельман, В. Г. Подвальный. Успехи физ. наук, 100, 193, 1970.
3. R. I. Weiss. X-ray Determination of Electron Distribution, Amsterdam, North-Holland, 1966.
4. В. Е. Форгов, Б. Н. Ломакин, Ю. Г. Красников. Теплофизика высоких температур, 9, 869, 1971.
5. Л. В. Альтшулер, А. А. Баканова. Успехи физ. наук, 96, 193, 1968.

УДК 533.932

ЭЛЕКТРОН-ИОННЫЕ КОРРЕЛИРОВАННЫЕ ПАРЫ В ПЛАЗМЕ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ *

В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин

В кинетической теории плазмы [1] традиционно большое внимание уделялось коллективным эффектам. Линейные по плазменному параметру α ($\alpha = \beta e^2 / r_D$; β — обратная температура, r_D — дебаевский радиус) поправки к формуле Спитцера были получены в работе Б. Б. Кадомцева [2], а затем в [3, 4]. Учет парных корреляций ограничивался рассмотрением лишь электрон-ионных связанных состояний — атомов. Однако парное взаимодействие приводит к появлению коррелированных пар как с отрицательной, так и с положительной энергией относительного движения (состояний рассеяния). Учет последних в кинетике является сложной задачей, однако при определенных условиях удается учесть состояния рассеяния при расчете кинетических коэффициентов. Так, например, авторы [5] воспользовались хорошо известным в теории рассеяния [6] эффектом задержки: при рассеянии частиц друг на друге время пролета области действия сил может оказаться значительно больше времени пролета этой области без взаимодействия. В этом случае можно говорить об образовании столкновительного комплекса [7] (СК). СК соответствует двум атомам, находящимся в окрестности точки поворота траектории рассеяния. Концентрация их определяется вкладом состояний непрерывного спектра во второй вириальный коэффициент [7], а время жизни — $\tau_{СК}$ — временем задержки Вигнера [6, 7].

В кинетике плазмы СК не рассматривались. В данной работе исследуются электрон-ионные пары в плазме с произвольной энергией относительного движения. Рассчитана электропроводность с учетом этих пар. Проводится сопоставление с экспериментами в плазме Ag [8–10], Cs [11], Xe [12].

Нас будут интересовать электрон-ионные пары, слабо взаимодействующие с окружением. Такими парами в первую очередь являются электрон — ближайший ион. Размер этих пар фактически не превосходит среднего расстояния между зарядами $r_{ср}$ (в дальнейшем используется параметр $\gamma = \beta e^2 / r_{ср}$; $8\gamma^2 = \alpha^2$). Запишем классическое выражение для плотности их внутренних состояний, используя приближение ближайшего соседа (ПБС) [13] (вычисления проводились в большом каноническом ансамбле)

$$g(E) = z_i \int dp dR F(R) [\delta(E - p^2/2m + e^2/R) - \delta(E - p^2/2m)] / (2\pi\hbar)^3. \quad (1)$$

Здесь $F(R) = \exp[-4\pi R^3(z_e + z_i)/3]$ — плотность вероятности события: электрон и ближайшая частица ион находятся на расстоянии R друг от друга; p и m — импульс и приведенная масса относительного движения; z_e и z_i — активности.

Характер относительного движения частиц в паре в зависимости от энергии меняется радикальным образом. Меняется также в зависимости от размера пары характер взаимодействия с третьей частицей. Целесообразно поэтому провести более детальную классификацию пар. Выделим четыре характерные группы (рис. 1).

Атомы (А) — состояния с большими отрицательными энергиями $E < -\beta^{-1}$. Концентрация их определяется соответствующим интегралом от плотности состояний (1). Следует отметить, что размер таких атомов не превосходит амплитуды кулоновского рассеяния $\sim \beta e^2$. Поэтому рассеяние тепловых электронов на них можно рассматривать как на одной частице.

* Материалы настоящего сообщения доложены на научной сессии по вопросу «Исследования плотной плазмы», проведенной 8–9 июня 1976 г. секцией низкотемпературной плазмы Научного Совета АН СССР по комплексной проблеме «Теплофизика».