Изв. АН Армянской ССР, Физика, 5, 113—117 (1970)

О СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВЕЩЕСТВА, НАХОДЯЩЕГОСЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

А. М. РЕЗИКЯН

С помощью теоремы вириала определен множитель Лагранжа, который, в частности, совпадает с множителем Лагранжа, определенным Томасом и Ферми для свободного атома и иона. А взамен приближенного выражения, полученного Слетером и Крутте, для вещества, находящегося под высоким давлением, получено точное выражение. Это в свою очередь дало возможность уточнить ход потенциала в элементарном шаре Вигнера—Зейтца.

Множитель Лагранжа в статистической теории встречается довольно часто, однако определяют его в каждом случае каким-либо частным способом.

Множитель Лагранжа для свободного нейтрального атома, согласно теории Томаса—Ферми (ТФ), равен нулю. Однако, как заметили Слетер и Крутте [1, 2, 3], для нейтрального атома, находящегося под внешним давлением, V_0 должно отличаться от нуля. Для определения V_0 Слетер и Крутте исходили из довольно грубого предположения о независимости потенциала в области центра атома (или вернее элементарного шара Вигиера — Зейтца) от величины внешнего давления. Они получили

$$eV_0 = [\varphi_0'(0) - \varphi'(0)]\,\frac{e^2 Z}{\mu}, \tag{2}$$

$$\mu = \frac{1}{4}\left(\frac{9\pi^2}{2Z}\right)^{1/3} a_0; \quad a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}.$$

Здесь $\varphi'(0)$—значение функции ТФ в центре элементарного шара с внешним давлением, а $\varphi_0'(0)$—без давления, a_0 — наименьший боровский радиус водородного атома, h—постоянная Планка, Z—порядковый номер элемента, e и m—заряд и масса электрона соответственно.

Ниже мы ограничиваемся рассмотрением сферически-симметричных систем с одним центром, имеющих положительный заряд eZ, и электронного газа плотностью ρ. Ниже все обозначения взяты из Гамбоша [1].

Кинетическая энергия электронного газа сферической конфигурации будет

$$E_k = \varkappa_k \int \rho^{\frac{5}{3}}\, dv, \tag{3}$$

где dv — элемент сферического объема, а r_0 — его радиус.

Если V—потенциал, а V_0—множитель Лагранжа, то для электронного газа в сфере имеет место уравнение ТФ:

$$\varphi'' = \frac{1}{\sqrt{x}}\varphi^{\frac{3}{2}}, \tag{4}$$

где

$$\varphi(x) = \frac{r}{eZ}(V - V_0),\ x = \frac{r}{\mu},$$

$$\rho = \frac{Z}{4\pi\mu^3}\left(\frac{\varphi}{x}\right)^{\frac{3}{2}},$$

первое граничное условие которого

$$x = 0,\ \varphi(0) = 1. \tag{5}$$

Второе граничное условие берем произвольным, пригодным для атомов и ионов, свободных и находящихся под внешним давлением. Имея в виду, что

$$\int \varphi'^2 dx = \frac{1}{7}(2\varphi\varphi' - 4\sqrt{x}\,\varphi^{\frac{5}{2}} + 5x\varphi'^2), \tag{6}$$

из (3) после учета (4), (5) и интегрирования получим

$$E_k = -\frac{3}{7}\frac{e^2Z^2}{\mu}\Big[\varphi'(0) + (x_0\varphi'(x_0) - \varphi(x_0) + 1)\varphi'(x_0) - \varphi'(x_0) -$$

$$- \frac{4}{5}\sqrt{x_0}\,\varphi^{\frac{5}{2}}(x_0)\Big]. \tag{7}$$

А потенциальная энергия

$$E_p = -\frac{1}{2}\int eV_e\,\rho dv - \int eV_k\,\rho dv, \tag{8}$$

где $V = V_e + V_k$,

$$eV_k = \frac{e^2Z}{\mu}\frac{1}{x},$$

$$eV = eV_0 + \frac{5}{3}\varkappa_k\,\rho^{\frac{2}{3}}. \tag{9}$$

Учитывая (4), (5), (6), (9), из (8) получим

$$E_p = \frac{6}{7}\frac{e^2Z^2}{\mu}\Big[\varphi'(0) + \frac{5}{12}(x_0\varphi'(x_0) - \varphi(x_0) + 1)\varphi'(x_0) - \varphi'(x_0) -$$

$$- \frac{1}{3}\sqrt{x_0}\,\varphi^{\frac{5}{2}}(x_0)\Big] - \frac{1}{2}eV_0Z(x_0\varphi'(x_0) - \varphi(x_0) + 1). \tag{10}$$

В (10) остается неопределенным V_0, его можно определить с помощью теоремы вириала, согласно которой

$$2E_k + E_p = 3\Omega P_0, \tag{11}$$

где Ω объем сферической системы, а P_0 давление электронного газа на ее границе, т. е. в точке $x = x_0$, Так как

$$= \frac{4}{3} \pi \mu^2 x_0^3,$$

$$P_0 = \frac{2}{3} \varkappa_k \rho^{\frac{5}{3}} (x_0),$$

$$3\Omega P_0 = \frac{2}{5} \frac{e^2 Z^2}{\mu} \left[\frac{\varphi(x_0)}{x_0} \right]^{\frac{5}{2}} x_0^3. \qquad (12)$$

Подставляя в (11) соответствующие значения из (7), (10), (13), получим

$$eV_0 = -\frac{e^2 Z}{\mu} \varphi'(x_0). \qquad (13)$$

Сохраняя общность выражения (13), можно его переписать и в ином виде.

Если общее число электронов в сфере N, то имеет место выражение

$$\int e\rho dv = eN,$$

которое дает известную связь

$$x_0 \varphi'(x_0) - \varphi(x_0) = -q, \quad q = \frac{Z-N}{Z}. \qquad (14)$$

Так что (13) может быть переписано в виде

$$eV_0 = -\frac{e^2 Z}{\mu} \left[\frac{\varphi(x_0)}{x_0} - \frac{q}{x_0} \right]. \qquad (15)$$

Из (10) и (13) получим потенциальную энергию электронов в окончательном виде:

$$E_p = \frac{6}{7} \frac{e^2 Z^2}{\mu} \left[\varphi'(0) + (x_0 \varphi'(x_0) - \varphi(x_0) \varphi'(x_0) - \frac{1}{3} \sqrt{x_0}\, \varphi^{\frac{5}{2}}(x_0) \right]. \qquad (16)$$

Полную энергию системы $E = E_k + E_p$ получим на основании (7) и (16):

$$E = \frac{3}{7} \frac{e^2 Z^2}{\mu} \left[\varphi'(0) + (x_0 \varphi'(x_0) - \varphi(x_0)) \varphi'(x_0) + \frac{2}{15} \varphi^{\frac{5}{2}}(x_0) \right]. \qquad (17)$$

Выражения (7), (13), (15), (16), (17) справедливы для атомов и ионов, свободных и находящихся под внешним давлением.

В частности, для атома ТФ, где $\varphi(x_0) = 0$, $x_0 \varphi'(x_0) = -q$ из (17) получим

$$E = \frac{3}{7} \frac{e^2 Z^2}{\mu} \left[\varphi'(0) + \frac{q^2}{x_0} \right],$$

из (15)

$$eV_0 = \frac{e^2Z}{\mu}\,\frac{q}{x_0} = \frac{e^2(Z-N)}{r_0},$$

т. е. получили ранее известные выражения.

Для элементарного шара Вигнера — Зейтца $x_0\varphi'(x_0) - \varphi(x_0) = 0$, тогда (17), (18) дают

$$E = \frac{3}{7}\,\frac{e^2Z^2}{\mu}\left[\varphi'(0) + \frac{2}{15}\sqrt{x_0}\,\varphi^{\frac{5}{2}}(x_0)\right],$$

что совпадает с соответствующим выражением, полученным Слетером и Крутте [1, 2]. Далее из (16) при $q=0$ получим

$$e\,V_0 = -\frac{e^2Z}{\mu}\,\frac{\varphi(x_0)}{x_0}. \qquad (18)$$

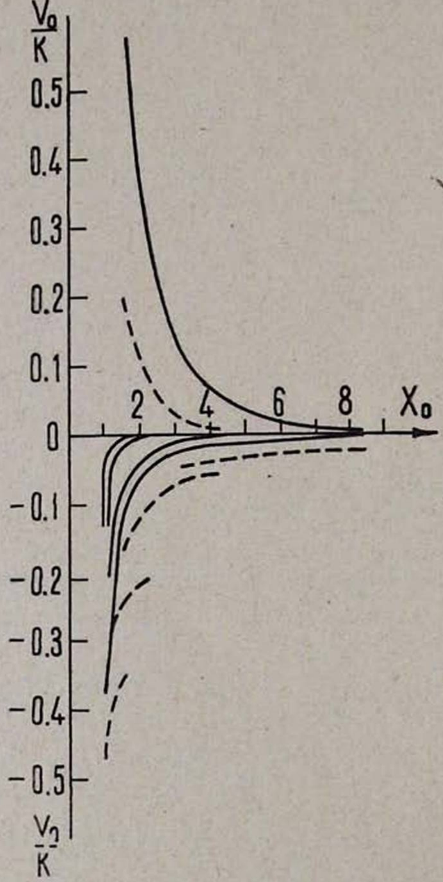

Рис. 1.

Это выражение отличается от выражения (2), полученного Слетером и Крутте.

На рис. 1 приведены кривые зависимости V_0 от x_0 $\left(V_0 \text{ в единицах } K = -\frac{eZ}{\mu}\right)$ для элементарного шара, сжатого внешними силами. Пунктирные кривые соответствуют данным Слетера и Крутте, а сплошные выражению (18).

Заметная разница кривых объясняется грубостью предположения Слетера и Крутте о независимости потенциала в непосредственной близости ядра от x_0. С уменьшением x_0 разница между кривыми растет, так как при этом потенциал около ядра начинает изменяться значительнее.

Из (4) и (15) получим распределение потенциала внутри сферической конфигурации в виде

$$V = \frac{eZ}{\mu}\left[\frac{\varphi(x)}{x} - \frac{\varphi(x_0)}{x_0} + \frac{q}{x_0}\right],$$

или при наличии нейтральности можно написать

$$V = \frac{eZ}{\mu}\left[\frac{\varphi(x)}{x} - \frac{\varphi(x_0)}{x_0}\right]. \qquad (19)$$

Согласно (19), для нейтральной сферической конфигурации с любым сферически-симметричным распределением зарядов, в том числе и для элементарного шара Вигнера — Зейтца, при $x=x_0$, V_0 равно нулю.

На рис. 1 с помощью выражения (19) приведен ход потенциала в зависимости от x в элементарном шаре Вигнера—Зейтца при различных x_0 (сплошные кривые). Одновременно приведены данные Слетера и Крутте по (2) (пунктирные кривые). Отличие $V(x_0)$ от нуля пунктирных кривых объясняется неточностью выражения (2).

Выражаю благодарность Г. М. Гарибяну за обсуждение работы.

Институт радиофизики и электроники
АН Арм.ССР

Поступила 22.IX.1959

ЛИТЕРАТУРА

1. *П. Гамбош*, Статистическая теория атома и ее применение, М., Изд. ИЛ (1951).
2. *J. C. Slater*, *H. M. Krutte*. Phys. Rev., 47, 559 (1935).
3. *R. P. Feynman*, *N. Metropolis*, *E. Teller*, Phys. Rev., 75, 1561 (1947).

ՄԵԾ ՃՆՇՄԱՆ ՏԱԿ ԳՏՆՎՈՂ ՆՅՈՒԹԻ ՍՏԱՏԻՍՏԻԿ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ՎԵՐԱԲԵՐՅԱԼ

Ա. Մ. ՌԵԶԻԿՅԱՆ

Վիրիալի թեորեմի օգնությամբ որոշված է Լագրանժի արտադրիչը ընդհանուր դեպքի համար։ Մասնավոր դեպքում մեծ ճնշման տակ գտնվող նյութի համար հաշվված է պոտենցիալի բաշխումը ճշգրտված Լագրանժի արտադրիչով։

ON STATISTICAL THEORY OF SUBSTANCE UNDER HIGH PRESSURE

A. M. RESIKIAN

The virial theorem is usual to determine the Lagrange factor which in particular coincides with that determined by Thomas and Fermi for a free atom and ion. An accurate expression of the Lagrange factor is found for a substance under high pressure and the potential distribution is calculated.