АКАДЕМИЯ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР

АСТРОФИЗИКА

ТОМ 7 НОЯБРЬ, 1971 ВЫПУСК 4

ЧИСЛО СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В КОНДЕНСИРОВАННОМ ВЕЩЕСТВЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЕГО ПЛОТНОСТИ

А. М. РЕЗИКЯН

Поступила 6 апреля 1971

С помощью статистической модели Томаса—Ферми рассчитано число образовавшихся свободных электронов в веществе вследствие роста плотности. Расчеты проведены для элементарного шара Вигнера—Зейтца и пригодны для плотностей до $2 \cdot 10^{6}$ $г/см^3$, имеющих место в звездах вплоть до некоторых белых карликов.

1. *Введение*. Как хорошо известно, в отличие от квантомеханического метода, статистический метод Томаса—Ферми (ТФ) менее точен, однако более прост для применения. Метод ТФ применяется не только к свободным атомам и ионам, но и к конденсированным веществам [1]. Впервые Слетер и Крутте дали статистическую теорию вещества, находящегося под высоким давлением [2]. Позже статистический метод был далее развит, была учтена обменная поправка [3—5]. Квантовые и другие поправки ввели Киржниц, Компанеец, Павловский, Калиткин [6]. Однако они не рассматривали область высоких давлений.

Ограничимся рассмотрением сферически симметричных атомов, следовательно, будем пользоваться элементарным шаром Вигнера—Зейтца. Кроме этого, для простоты не будут учтены поправки к статистическому методу ТФ, так как здесь считаются важными физические аспекты решения поставленной задачи.

Обычно, применяя статистический метод ТФ к атому или элементарному шару Вигнера—Зейтца, считают, что электроны, находящиеся в потенциальном поле ядра, свободны [1]. Однако для элементарного шара уместно ставить вопрос о том, какая доля этих электронов удерживается вокруг ядра ядерным электрическим полем и какая часть—внешним давлением, приложенным к элементарному шару. Таким образом, имеется в виду то, что некоторые электроны элементарного шара могут обладать столь большой кинетической энергией, что им нетрудно преодолеть потенциальное поле ядра и перейти из одного элементарного шара в другой. Это означает, что речь идет о разделении электронов элементарного шара на внутренние, удерживаемые ядерным электрическим полем, и свободные в обычном понимании, как это имеет место для электронов металла. Число свободных электронов, приходящих на один элементарный шар, зависит от внешнего давления, так как с ростом давления растет кинетическая энергия электронов, соответственно растет и число свободных электронов.

Исходя из приведенных соображений, ниже будет определено число свободных электронов в веществе в зависимости от высокой плотности.

2. *Степень внутренней ионизации вещества.* Полная энергия электрона ε, имеющего импульс P и находящегося в потенциальном поле ядра на расстоянии r от него, будет

$$\varepsilon = \frac{P^2}{2m} - eV, \tag{1}$$

где e, m — заряд и масса электрона, а V — потенциал. Если кинетическая энергия электронов максимальна, то $P = P_\mu$ и из (1)

$$\varepsilon_\mu = \frac{P_\mu^2}{2m} - eV. \tag{2}$$

Из (1) и (2), исключая eV, получим выражение (1) в новом виде:

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}(P^2 - P_\mu^2) + \varepsilon_\mu. \tag{3}$$

Для элементарного шара ε_μ будет определен ниже. К элементарному шару применим обозначения ТФ

$$eV - eV_0 = \frac{e^2 Z}{\mu}\frac{\varphi(x)}{x}, \qquad x = \frac{r}{\mu},$$

$$\mu = \frac{1}{4}\left(\frac{9\pi^2}{2Z}\right)^{\frac{1}{3}} a_0, \qquad a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}, \tag{4}$$

где Z — порядковый номер элемента, $\varepsilon_\mu = -eV_0$ — максимальная энергия электрона, V_0 — наивысший потенциал элементарного шара или химический потенциал [7].

Величину ε_μ легко определить. Действительно, так как элементарный шар электрически нейтрален, то на его границе $x = x_0$ потенциал V должен равняться нулю. Поэтому из (4) получим [8]

$$-eV_0 = \frac{e^2 Z}{\mu}\frac{\varphi(x_0)}{x_0} = \varepsilon_\mu. \tag{5}$$

На основании (5) выражение (4) можно переписать в виде

$$eV = \frac{e^2 Z}{\mu}\left(\frac{\varphi(x)}{x} - \frac{\varphi(x_0)}{x_0}\right). \tag{6}$$

Число электронов в единице объема, импульс которых лежит в интервале P, $P + dP$ и соответственно энергия в интервале ε, $\varepsilon + d\varepsilon$ будет [1, 7].

$$dn = \frac{8\pi}{h^3} P^2 dP. \tag{7}$$

Подставляя сюда из (1) найденное P, получим

$$dn = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3}(\varepsilon + eV)^{\frac{1}{2}} d\varepsilon, \tag{8}$$

где $n = n(\varepsilon, r)$, $V = V(r)$.

Для определения плотности электронов, а также для последующего необходимо иметь в виду, что кинетическая энергия электронов элементарного шара изменяется от нулевого значения до максимального и равного $P_\mu^2/2m$. Поэтому, интегрируя (8), мы должны выбрать пределы следующим образом: при $P = 0$ из (1) получим $\varepsilon_0 = -eV$, а при $P = P_\mu$ из (3) $\varepsilon_1 = \varepsilon_\mu = -eV_0$. Тогда (8) дает

$$n(\varepsilon_1, r) = \rho = \frac{8\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{3h^3}(eV - eV_0)^{\frac{3}{2}}. \tag{9}$$

Используя (4), получим окончательно

$$\rho = \frac{Z}{4\pi\mu^3}\left(\frac{\varphi(x)}{x}\right)^{\frac{3}{2}}. \tag{10}$$

Таким образом, получили известное выражение ТФ.

Определим теперь плотность внутренних электронов, исходя из следующего представления. Все те электроны, у которых кинетическая энергия меньше или равна потенциальной энергии eV, будут связаны с ядром. Максимальная энергия внутренних электронов ε_2 определится из условия

$$eV = \frac{P^2}{2m},$$

что, согласно (1), даст $\varepsilon_2 = 0$. Итак, плотность внутренних электронов определится из (8).

$$n(\varepsilon_2, r) = \rho_в = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\int_{-eV}^{0}(\varepsilon + eV)^{\frac{1}{2}}d\varepsilon = \frac{8\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{3h^3}(eV)^{\frac{3}{2}}, \quad (11)$$

что, согласно (6), даст

$$\rho_в = \frac{Z}{4\pi\mu^3}\left(\frac{\varphi(x)}{x} - \frac{\varphi(x_0)}{x_0}\right). \quad (12)$$

Функция $\varphi(x)$ удовлетворяет известному дифференциальному уравнению ТФ

$$\varphi'' = \frac{1}{\sqrt{x}}\varphi^{\frac{3}{2}}. \quad (13)$$

Применительно к элементарному шару граничные условия будут следующими [1]:

$$\begin{aligned} x &= 0, \quad \varphi(0) = 1, \\ x &= x_0, \quad x_0\varphi'(x_0) - \varphi(x_0) = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

Зная ρ и $\rho_в$, легко определить плотность свободных электронов ρ_c из очевидного соотношения

$$\rho = \rho_c + \rho_в. \quad (15)$$

Подставляя в (15) соответствующие выражения из (10) и (12), получим плотность свободных электронов в окончательном виде

$$\rho_c = \frac{Z}{4\pi\mu^3}\left[\left(\frac{\varphi(x)}{x}\right)^{\frac{3}{2}} - \left(\frac{\varphi(x)}{x} - \frac{\varphi(x_0)}{x_0}\right)^{\frac{3}{2}}\right]. \quad (16)$$

Для определения степени внутренней ионизации обозначим число внутренних электронов в элементарном шаре через N, тогда число свободных электронов будет $Z - N$, что, очевидно, равно

$$Z - N = 4\pi\int \rho_c r^2 dr = 4\pi\mu^3\int_0^{x_0}\rho_c x^2 dx. \quad (17)$$

Используя (16), получим

$$q=\int_0^{x_0}\left|\left(\frac{\varphi(x)}{x}\right)^{\frac{3}{2}}-\left(\frac{\varphi(x)}{x}-\frac{\varphi(x_0)}{x_0}\right)^{\frac{3}{2}}\right|x^2dx, \tag{18}$$

где

$$q=\frac{Z-N}{Z}.$$

В отличие от степени ионизации свободного атома величину q назовем степенью внутренней ионизации. Отличие от обычной ионизации состоит в том, что здесь ионизуется атом в конденсированном веществе, и поэтому оторванные от атома электроны остаются в окружении ядра, сохраняя его нейтральность, тогда как ионизованный свободный атом приобретает положительный заряд.

Выражение (18) можно упростить. С помощью дифференциального уравнения (13) первый интеграл берется

$$\int_0^{x_0}\left(\frac{\varphi(x)}{x}\right)^{\frac{3}{2}}x^2dx=x_0\varphi'(x_0)-\varphi(x_0)+1,$$

что, согласно второму условию (14), равно единице. Таким образом (18) перепишем в виде

$$q=1-\int_0^{x_0}\left(\frac{\varphi(x)}{x}-\frac{\varphi(x_0)}{x_0}\right)^{\frac{3}{2}}x^2dx. \tag{19}$$

Представляет интерес также величина α, определяющая концентрацию свободных электронов.

$$\alpha=\frac{\rho_c}{\rho}, \tag{20}$$

что с помощью (10) и (16) даст

$$\alpha=1-(1-K)^{\frac{3}{2}},\qquad K=\frac{\varphi(x_0)}{\varphi(x)}\frac{x}{x_0}. \tag{21}$$

Как следует из выражений (18) и (19), степень внутренней ионизации q в приближении ТФ является универсальной величиной, не зависящей от рода вещества в явном виде.

Зависимость q от x_0 приведена на рис. 1, причем, выражение (19) рассчитано совместно с дифференциальным уравнением (13) с помощью вычислительной машины „Раздан-2“. На рис. 1 видно, что с повышением плотности (т. е. с уменьшением x_0) степень внутренней ионизации растет и при $x_0 = 0$ стремится к единице. Причем, если n_1 — число атомов в единице объема, то

$$x_0^3 = \frac{3}{4\pi\mu^3}\frac{1}{n_1}.$$

Известно, что статистический метод ТФ не применим к металлам без внешнего давления вследствие отсутствия устойчивости. Тем не менее, мы попытались сравнить значения величины q, приведенные на рис. 1, с реальным q металлов, без внешнего давления. При этом число свободных электронов, приходящих на один ион металла,

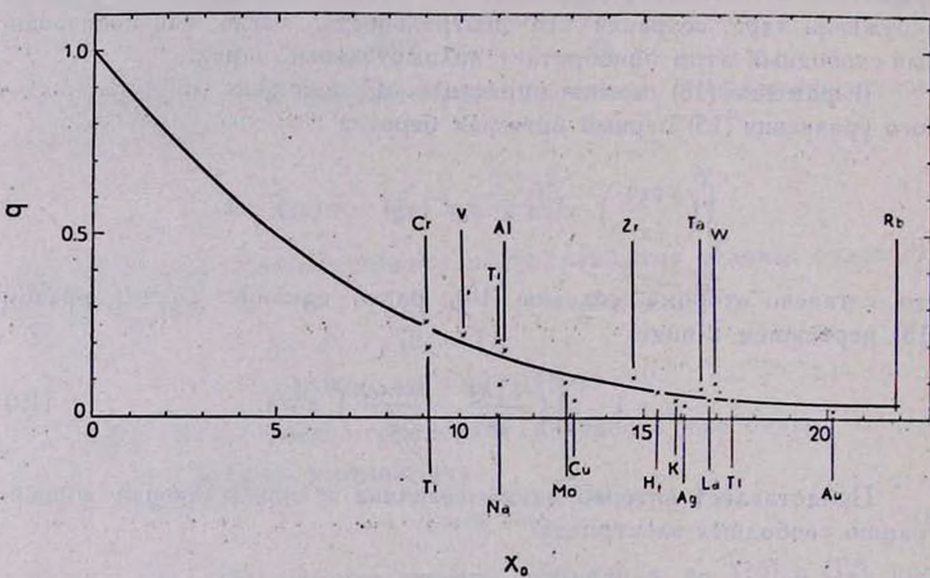

Рис. 1.

принято равным его химической валентности, а x_0 определялся с помощью постоянных решетки по данным [9]. Как и следовало ожидать, существуют отклонения реальных значений от теоретической кривой. Так как экспериментально определенные значения чисел свободных электронов несколько ниже химической валентности, то указанный разброс должен быть больше.

На рис. 2 приведенные кривые рассчитаны по (21). Как показывают кривые, большая концентрация свободных электронов находится у периферии элементарного шара, где напряженность электрического поля слаба. С уменьшением x_0 большая концентрация свободных электронов распространяется и к центру шара. Это соответствует реальной картине ионизации.

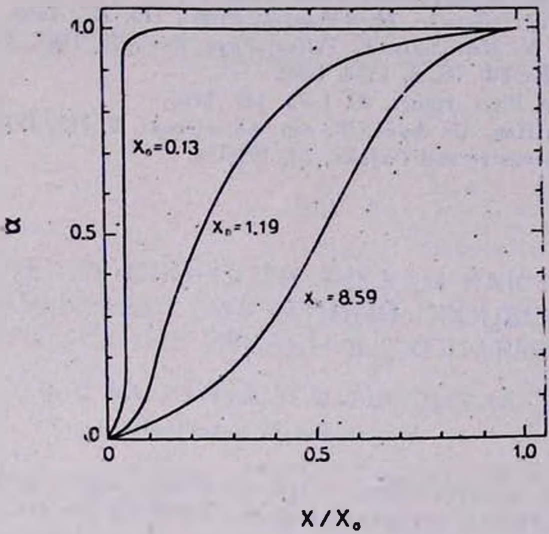

Рис. 2.

Так как в расчетах релятивистская поправка не учтена, то они пригодны вплоть до плотностей $2 \cdot 10^6$ $г/см^3$. Такие плотности существуют в звездах. Указанная область плотностей охватывает также часть белых карликов.

Институт радиофизики и электроники
АН АрмССР

NUMBER OF FREE ELECTRONS IN CONDENSED SUBSTANCES DEPENDING ON THEIR DENSITY

A. M. RESIKIAN

By means of the Thomas-Fermi statistical model the number of free electrons appearing in the substance under high pressure (i. e. high densities) is found. Calculations are being carried out for an elementary Wigner-Seitz sphere. The number of free electrons is shown to rise, when the density rises. These calculations are suitable for nonrelativistic densities only. Thus they are fit for a part of white dwarfs.

ЛИТЕРАТУРА

1. *П. Гамбош,* Статистическая теория атома и ее применения, М., 1951.
2. *I. S. Slater,* Rew. Mod. Phys., 6, 209, 1934.
3. *I. S. Slater, H. M. Krutte,* Phys. Rev., 47, 559, 1935.
4. *H. Iensen, G. Mayer-Gossler, H. Rohde,* Z. Phys., 110, 277, 1958.
5. *R. P. Feynman, N. Metropolis, E. Teller,* Phys. Rev., 75, 1561, 1947.
6. *Н. Калиткин,* ЖЭТФ, 38, 5, 1534, 1960.
7. *P. Gombas,* Acta Phys. Hung., 20, 1—2, 149, 1966.
8. *А. М. Резикян,* Изв. АН АрмССР, сер. физическая, 5, 113, 1970.
9. Handbook of Chemistry and Physics, 57, 1955-56.