



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

95-453

P4-95-453

В.Б.Беляев, М.А.Минеев\*

РАСШИРЕНИЕ МЕТОДА ТОМАСА—ФЕРМИ  
НА СИСТЕМЫ С АКСИАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ

Направлено в «Journal of Physics A. Mathematical and General»

---

\*Тверской государственный университет

1995

Благодаря своей простоте и наглядности метод Томаса-Ферми (Т-Ф) получил широкое распространение во многих областях физики. Имеющий дело с проблемой описания атомов с  $N$  электронами в момент его формирования [1,2], метод Т-Ф был затем применён и к макроскопическим объектам, таким как нейтронные звёзды и белые карлики [3,4].

Далее развитие метода шло по пути более адекватного учёта квантовых эффектов [5,6] и расширения на системы с небольшим числом частиц. В последнем случае продвижение оказалось столь успешным, что удалось описать энергию атома водорода - систему, состоящую всего из двух частиц [7,8].

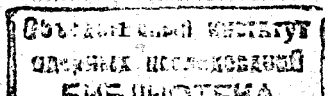
Описание метода Т-Ф в его современном виде можно найти в обзоре [9].

Ниже будет изложена попытка обобщения метода Т-Ф несколько в другом направлении, а именно на системы, не обладающие центральной симметрией.

Мотивировкой для такого типа обобщений является желание расширить теорию малочастичных систем на случаи взаимодействия кластеров, внутренняя структура которых описывается уравнением Т-Ф. Простейшим примером здесь может служить система двух атомов, сталкивающихся при энергии, не достаточной для возбуждения внутриатомных состояний.

Если описывать такую систему в переменных  $\vec{R}; \vec{r}$  (см. рис. 1), где  $\vec{R}$  - расстояние между ядрами, а  $n(\vec{r})$  - плотность заряда, то по числу динамических переменных эта система эквивалентна трёхчастичной системе.

Ниже мы ограничимся адиабатическим описанием системы, т.е.  $R$  будет рассматриваться как параметр, а не динамическая переменная. Более того, будет рассмотрен предельный случай, когда расстояние между атомами  $R$  много меньше размера атома.



При описании аксиально-симметричной системы с малым отклонением от центральной симметрии будем исходить из уравнения

$$\Delta_{\vec{r}}\Phi(\vec{r}, \vec{R}) = D\Phi^{3/2}(\vec{r}, \vec{R}), \quad D = \frac{4e}{3\pi\hbar^3}(2e\mu)^{3/2}, \quad (1)$$

которое, очевидно, при  $R = 0$  переходит в обычное уравнение Т-Ф. Использование уравнения (1) для описания потенциала системы с аксиальной симметрией может быть мотивировано следующим образом. Как известно [10], в основе получения уравнения Т-Ф для заряженных частиц лежат два принципа:

- а) потенциал системы удовлетворяет уравнению Пуассона;
  - б) имеет место квазиклассичность в движении заряженных частиц.
- Ясно, что первое условие выполняется для любого типа распределения плотности заряда, включая аксиально-симметричное распределение. Также естественно ожидать, что если условие квазиклассичности выполняется для центрально-симметричной системы, то оно будет выполняться и для системы с малым отклонением от сферической симметрии.

Из соображений симметрии удобно решение уравнения (1) искать в форме

$$\Phi(\vec{r}, \vec{R}) = \Phi_{Z/2}^{TF}\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right) + \Phi_{Z/2}^{TF}\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right) + Q(\vec{r}, \vec{R}), \quad (2)$$

где, например,  $\Phi_{Z/2}^{TF}(\vec{r} - \vec{R}/2)$  есть решение обычного уравнения Т-Ф

$$\Delta_{\vec{r}}\Phi_{Z/2}^{TF}(\vec{r}) = D[\Phi_{Z/2}^{TF}(\vec{r})]^{3/2} \quad (3)$$

для атома с зарядом  $Z/2$ , сдвинутого в точку  $\vec{r} - \vec{R}/2$ .

Очевидно, что если исходный заряд всей системы равен  $Z$ , то при  $R \rightarrow 0$  решение (2) стремится к решению уравнения Т-Ф для заряда  $Z$ , т.е.  $Q \rightarrow 0$  при  $R \rightarrow 0$ .

Другим преимуществом представления (2) является тот факт, что сингулярности точного решения, очевидно, расположенные в симметричных точках  $\vec{r} + \vec{R}/2$  и  $\vec{r} - \vec{R}/2$ , по определению не содержатся в неизвестной функции  $Q$ . Последнее обстоятельство позволяет линеаризовать уравнение (1) относительно функции  $Q$ .

В результате линеаризации приходим к неоднородному уравнению для функции  $Q(\vec{r}, \vec{R})$ :

$$\begin{aligned} \Delta_{\vec{r}}Q - U(\vec{r}, \vec{R})Q &= D \left[ \Phi_{Z/2}^{TF}\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right) + \Phi_{Z/2}^{TF}\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right) \right]^{3/2} - \\ &- \Delta_{\vec{r}} \left( \Phi_{Z/2}^{TF}\left(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}\right) + \Phi_{Z/2}^{TF}\left(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}\right) \right). \\ U(\vec{r}, \vec{R}) &= \frac{3}{2}D\sqrt{\Phi(r, 0)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Учитывая уравнение (3), убеждаемся, что правая часть уравнения (5) исчезает при  $R = 0$  и любых  $r$ , а также вблизи особых точек, т.е. при  $\vec{r} \simeq \pm \vec{R}/2$ . Таким образом практически во всей интересующей нас области уравнение для  $B$  является однородным. Поскольку для решения неоднородного уравнения (5) потребуется решение соответствующего однородного, мы для начала ограничимся решением однородного уравнения.

Перейдем к безразмерным потенциалам и координатам:

$$Q(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{Ze}{r}B(\vec{r}, \vec{R}); \quad \Phi(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{Ze}{r}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (5)$$

и

$$x = \frac{rZ^{1/3}}{b}, \quad b = 0,885a_0, \quad (6)$$

$a_0$  - боровский радиус электрона, а  $X$  - безразмерный параметр:

$$X = \frac{RZ^{1/3}}{b}. \quad (7)$$

Разлагая решение  $B(x, \vartheta, X)$  по парциальным волнам и ограничиваясь в "потенциале"  $V$  низшим порядком по  $X$ , приходим к уравнению

$$\frac{d^2 B_l(x, X)}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} B_l(x, X) = V(x) B_l(x, X), \quad (8)$$

$$V(x) = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\Psi(x, 0)}{x}}$$

Зависимость от параметра  $X$  в решении уравнения (8) возникает из-за граничных условий на функцию  $B_l$ , к рассмотрению которых мы теперь переходим.

Итак, рассмотрим представление (2) в пределе малых  $X$ . Разлагая выражение  $\Psi_{Z/2}^{TF}(\vec{x} + \vec{X}/2) + \Phi_{Z/2}^{TF}(\vec{x} - \vec{X}/2)$  в ряд по степеням  $X$ , перепишем (2) в форме

$$\Psi_Z^{TF}(x, 0) = \Psi_Z^{TF}(x, 0) + \frac{1}{2} \nabla_X^2 \left[ \Psi_{Z/2}^{TF}(\vec{x} + \frac{\vec{X}}{2}) + \Psi_{Z/2}^{TF}(\vec{x} - \frac{\vec{X}}{2}) \right] \Big|_{X=0} X^2 + B(\vec{x}, \vec{X}). \quad (9)$$

Заменяя потенциалы в правой части на потенциалы точечных зарядов, что верно при малых  $x$ , для искомой функции  $B$  получаем

$$B_2 = 1 \text{ при } x = \frac{X}{2}, X \ll 1; \quad (10)$$

здесь  $B_2(x)$  - вторая гармоника в разложении решения  $B(x, \vartheta, X)$  по полиномам Лежандра.

Итак, для нахождения поправки к центральному потенциалу Т-Ф необходимо решить уравнение

$$\frac{d^2}{dx^2} B_2(x) - \frac{6}{x^2} B_2(x) = V(x) B_2(x) \quad (11)$$

с граничными условиями

$$B_2\left(\frac{X}{2}\right) = 1, B_2(x_0) = 0, \quad (12)$$

где  $x_0$  - радиус атома в безразмерных единицах. Уравнение (11) имеет вид уравнения Шрёдингера с некоторым короткодействующим потенциалом  $V(x)$ , поэтому для его решения воспользуемся одним из стандартных методов решения таких уравнений.

Как известно [11], любой короткодействующий потенциал можно аппроксимировать нелокальным сепарабельным потенциалом так, что его действие на неизвестную функцию  $|B_2\rangle$  изображается как

$$V|B_2\rangle \approx V|\chi\rangle = \frac{\langle \chi|V|B_2\rangle}{\langle \chi|V|\chi\rangle} = C \cdot V|\chi\rangle, \quad (13)$$

где

$$C = \frac{\langle \chi|V|B_2\rangle}{\langle \chi|V|\chi\rangle} \quad (14)$$

- неизвестная константа,  $|\chi\rangle$  - некоторая вспомогательная функция. После применения приближения (13) уравнение (11) принимает вид

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - \frac{6}{x^2} \right) B_2(x) = CV(x)\chi(x). \quad (15)$$

Решая уравнение (15) методом вариации постоянных, получаем

$$B_2(x) = -\frac{C}{5x^2} \int_0^x t^3 V(t)\chi(t) dt + \frac{C}{5} x^3 \int_x^\infty \frac{dt}{t^2} V(t)\chi(t) + K_1 x^3 + K_2 \frac{1}{x^2}, \quad (16)$$

где  $K_1$  и  $K_2$  - также неизвестные константы.

Из определения  $C$  и представления (16) получаем связь между константами:

$$C = K_1 \alpha + K_2 \beta, \quad (17)$$

$\alpha$  и  $\beta$  - матричные элементы потенциала  $V(x)$ , которые будут приведены в приложении. Наконец, константы  $K_1$  и  $K_2$  определяем из граничных условий (12) для функции  $B_2$ .

## 4

Для нахождения поправки  $B_2$ , возникающей при отклонении распределения заряда от сферически-симметричного, зададимся неким модельным распределением для функции  $\Psi(x) \equiv \Psi(x, 0)$ . Пусть для простоты  $\Psi(x)$  имеет вид ступеньки:

$$\Psi(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \leq x_0, \\ 0, & \text{если } x > x_0. \end{cases} \quad (18)$$

Вспомогательную функцию  $\chi(x)$ , используемую в сепарабельном представлении (13), выберем также в виде ступенчатой функции в области  $0 \leq x \leq x_0$ , поскольку по определению вспомогательные функции должны быть локализованы в области, где решение отлично от нуля.

В результате для поправки  $B_2(x)$  получаем аналитическое выражение

$$B_2(x) = \frac{x^{-2}}{g_1} + a_1 x^{3/2} - a_2 x^3. \quad (19)$$

Выражения для  $g_1$ ,  $a_1$  и  $a_2$  приведены в приложении.

Итак, можно прийти к заключению, что при малом отклонении от сферической симметрии метод Т-Ф допускает однозначное обобщение. Поправка к центрально-симметричному потенциалу удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению второго порядка и может быть найдена стандартными методами. В работе использовался аналитический и численный методы. Как показано на рис.2, оба метода дают близкие результаты.

Противоположный предельный случай уравнений Т-Ф, когда  $R \gg x_0$ , по-видимому, также может быть линеаризован на основе представления (2).

## Приложение

$$\alpha = \frac{\langle \chi | V | \phi_1 \rangle}{\langle \chi | V | \chi \rangle + \frac{1}{5} \langle \chi | V | \phi_2 \Phi_2 - \phi_1 \Phi_1 \rangle}, \quad (20)$$

$$\beta = \frac{\langle \chi | V | \phi_2 \rangle}{\langle \chi | V | \chi \rangle + \frac{1}{5} \langle \chi | V | \phi_2 \Phi_2 - \phi_1 \Phi_1 \rangle}, \quad (21)$$

$$\Phi_1(x) = \int_x^\infty \frac{\phi_2(t)v(t)\chi(t)}{\sqrt{t}} dt, \quad (22)$$

$$\Phi_2(x) = \int_x^\infty \frac{\phi_1(t)v(t)\chi(t)}{\sqrt{t}} dt, \quad (23)$$

$$v(t) = V(t)\sqrt{t}; \quad \phi_1(t) = t^3; \quad \phi_2(t) = t^{-2}, \quad (24)$$

$$a_1 = 4 \left[ \frac{1}{7g_1\eta_1} - \frac{g_2x_0^{7/2}}{49\eta_2} \right], \quad (25)$$

$$a_2 = \frac{x_0^{3/2}}{g_1\eta_1} + g_2 \left[ 1 + \frac{x_0}{7\eta_2} \right], \quad (26)$$

$$\eta_1 = x_0^2 + \frac{3}{154}x_0^{7/2}, \quad \eta_2 = x_0^{5/2} - \frac{3}{154}x_0^4, \quad (27)$$

$$g_1 = f_1(X/2) - \frac{f_1(x_0)f_2(X/2)}{f_2(x_0)}, \quad (28)$$

$$g_2 = \frac{f_1(x_0)}{f_2(x_0) [f_1(X/2) - f_1(x_0)f_2(X/2)/f_2(x_0)]}, \quad (29)$$

$$f_1(x) = x^{-2} - \frac{1}{\eta_1}f(x), \quad (30)$$

$$f_2(x) = x^3 - \frac{x_0^{7/2}}{7\eta_2}f(x), \quad (31)$$

$$f(x) = \left( -\frac{4}{7}x^{3/2} + \frac{x^3}{x_0^{3/2}} \right). \quad (32)$$

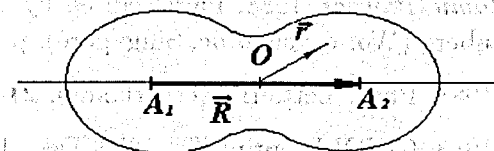


Рис. 1

R - расстояние между ядрами;

O - начало координат;

A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub> - точки расположения ядер.

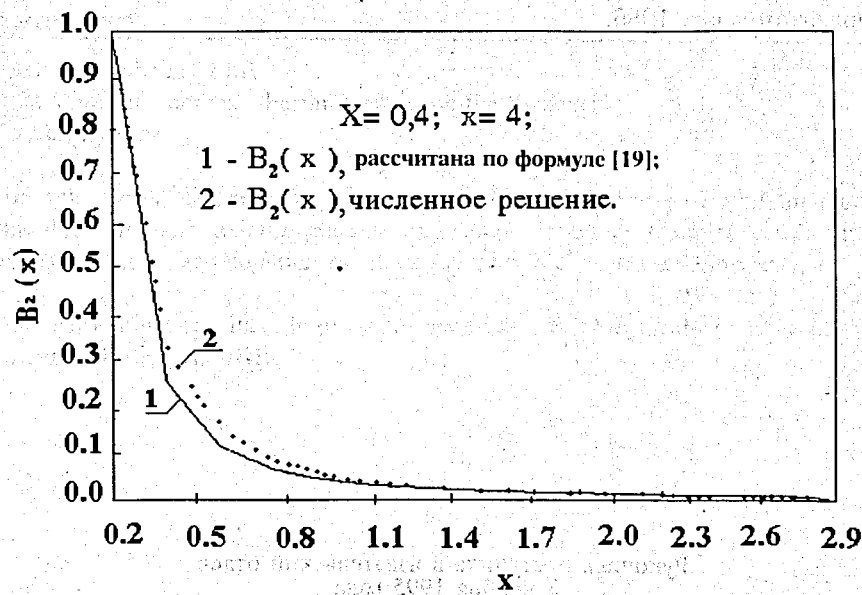


Рис. 2

# Литература

1. Fermi, E., 1927, Rend. Accad. Naz. Lincei **6**, 602.
2. Thomas, L.H., 1927, Proc. Cambridge Philos. Soc. **23**, 542.
3. Orear, J., and E.E. Salpeter, 1973, Am. J. Phys. **41**, 1131.
4. Van Horn, H.M., 1979, Phys. Today **32**, 23.
5. Witten, E., 1980, Phys. Today **33**, 38.
6. Herschbach, D.R., 1989, in *Proceedings of Eleventh International Conference on Atomic Physics*, 1988, Paris, edited by S. Haroche, J.C. Gray, and G. Grynberg (World Scientific, Singapore), p. 63.
7. Martin, A., 1988, Phys. Lett. B (Netherlands), **214**, 561.
8. Martin, A., 1988, CERN Preprint TH 5259, Dec. 1988.
9. Spruch, L., 1991, Rev. of Mod. Phys., Vol. **63**, No. 1, 152.
10. Давыдов А.С., Квантовая механика. - М.: Наука, 1973.
11. Беляев В.Б., Лекции по теории малочастичных систем. - М.: Энергоатомиздат, 1986.

Рукопись поступила в издательский отдел  
8 ноября 1995 года.