СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4-96-221

В.Л.Любошиц

ТЕОРЕМА ВИРИАЛА И УСЛОВИЯ РАВНОВЕСИЯ СИСТЕМЫ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1996

1. Для системы N взаимодействующих друг с другом частиц, движущихся в ограниченной области пространства, справедлива так называемая «теорема вириала» (см., например, [1—4]), согласно которой выполняется равенство

$$\overline{T} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \overline{\mathbf{r}_i \, \mathbf{F}_i}. \tag{1}$$

Здесь $T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2$ — суммарная кинетическая энергия системы, $\mathbf{r}_i$ — радиус-вектор i-й частицы, $\mathbf{F}_i = \frac{d\mathbf{p}_i}{dt}$ — сила, действующая на i-ю частицу; черта означает усреднение по времени. Подчеркнем, что при финитном движении средняя суммарная сила, действующая на систему, должна быть равна нулю (поскольку $\sum_i \mathbf{F}_i = \frac{d}{dt} \sum_i m_i \mathbf{v}$). Равенство

$$\overline{\sum_i \mathbf{F}_i} = 0 \tag{2}$$

обеспечивает инвариантность соотношения (1) относительно выбора начала координат.

Пусть система N заряженных частиц находится во внешнем магнитном поле. Если при этом движение остается финитным и на систему не действуют никакие другие внешние силы, кроме сил Лоренца, в формуле (1) следует положить

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i \, U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \ldots \mathbf{r}_N) + \frac{e_i}{c} [\mathbf{v}_i \, \mathbf{H}(\mathbf{r}_i)], \tag{3}$$

где $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \ldots \mathbf{r}_N)$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц*, $\mathbf{v}_i$ — скорость i-й частицы, e_i — ее заряд, $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i)$ — напряженность магнитного поля в точке нахождения i-й частицы. Подставляя (3) в (1), получаем

*Мы анализируем общий случай, когда взаимодействие между заряженными частицами не сводится только к кулоновскому взаимодействию.

$$T = \frac{1}{2}\overline{\sum_i^N \mathbf{r}_i \nabla_i U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)} - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N \frac{e_i}{c}\overline{(\mathbf{r}_i\,[\mathbf{v}_i\,\mathbf{H}(\mathbf{r}_i)])}$$

или

$$\overline{T} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i\nabla_i U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) - \sum_{i=1}^N \mathcal{M}_i\,\mathbf{H}(\mathbf{r}_i), \tag{5}$$

где

$$\mathcal{M}_i = \frac{1}{2}\frac{e_i}{c}[\mathbf{r}_i\mathbf{v}_i] - \tag{6}$$

магнитный момент i-й частицы, связанный с ее орбитальным движением. Таким образом, в вириальном соотношении появляется член, соответствующий взаимодействию внешнего магнитного поля с магнитными моментами частиц.

Рассмотрим важный случай, когда потенциальная энергия складывается из парных потенциалов $\varphi_{ik}(r_{ik})$, зависящих только от расстояния между частицами:

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2}\sum_{i\neq k}\sum \varphi_{ik}(r_{ik}), \qquad r_{ik} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|. \tag{7}$$

Тогда формула (5) переписывается в виде (ср. с [4])

$$\overline{T} = \frac{1}{4}\sum_{i\neq k}\sum \overline{r_{ik}\frac{d}{dr_{ik}}\varphi_{ik}(r_{ik})} - \overline{\sum_i \mathcal{M}_i\,\mathbf{H}(\mathbf{r}_i)}. \tag{8}$$

В однородном магнитном поле имеем

$$\overline{T} = \frac{1}{4}\sum_{i\neq k}\sum \overline{r_{ik}\frac{d}{dr_{ik}}\varphi_{ik}(r_{ik})} - \overline{\mathbf{M}}\mathbf{H}, \tag{9}$$

где $\overline{\mathbf{M}}$ — средний магнитный момент системы, связанный с орбитальным движением частиц. В частности, при чисто кулоновском взаимодействии между заряженными частицами, когда $\varphi_{ik} \sim \frac{1}{r_{ik}}$, формула (9) дает

$$\overline{T} + \overline{\mathbf{M}}\mathbf{H} = -\frac{\overline{U}}{2}, \tag{10}$$

где $\overline{U}$ — средняя потенциальная энергия. Полная энергия взаимодействия в этом случае

$$\mathcal{E} = \overline{T} + \overline{U} = -\overline{T} - 2\overline{\mathbf{M}}\mathbf{H}. \tag{11}$$

При $H = 0$ из (10) и (11) следуют хорошо известные соотношения для замкнутой системы частиц, взаимодействующих по закону Кулона:

$$2\overline{T} = -\overline{U}, \qquad \mathcal{E} = -\overline{T}.$$

Легко убедиться в том, что вириальное соотношение (9) справедливо и для изолированной заряженной частицы, движущейся по окружности в плоскости, перпендикулярной направлению однородного магнитного поля (в этом случае $\varphi = 0$). Действительно, из уравнения движения в магнитном поле

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = -\frac{m\mathbf{v}^2}{r^2}\mathbf{r} = \frac{e}{c}[\mathbf{vH}]$$

следует, что

$$T = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} = -\frac{e}{2c}([\mathbf{vH}]\,\mathbf{r}) = -\mathcal{M}\mathbf{H}. \tag{12}$$

Здесь

$$\mathcal{M} = \frac{e}{2c}[\mathbf{rv}] -$$

магнитный момент, который в случае движения заряженной частицы по окружности не зависит от времени и всегда направлен в сторону, противоположную направлению магнитного поля.

2. Теорема вириала для системы заряженных частиц в магнитном поле сохраняет свой смысл и в рамках квантово-механических представлений. При этом финитному движению соответствуют стационарные состояния в дискретном спектре энергий (или некогерентная смесь таких состояний), а вместо средних по времени рассматриваются квантово-механические средние операторов [3,4]. Таким образом, в соответствии с формулой (5) мы можем написать

$$\langle\hat{T}\rangle = \frac{1}{2}\left\langle\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i\nabla_i U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N)\right\rangle - \left\langle\sum_{i=1}^N \hat{\mathcal{M}}_i\,\mathbf{H}(\mathbf{r}_i)\right\rangle. \tag{13}$$

где $\hat{T}$ — оператор кинетической энергии, $\hat{\mathcal{M}}_i$ — оператор магнитного момента i-й частицы, U — потенциал взаимодействия; знак $\langle\dots\rangle$ здесь и в дальнейшем означает квантово-механическое (и статистическое для макроскопических тел) усреднение.

Согласно (13) в однородном магнитном поле H в случае кулоновского взаимодействия между частицами (конкретно речь может идти об электронах и ядрах в атомах и молекулах) выполняется равенство

$$2\langle\hat{T}\rangle = -\langle U\rangle - 2\langle\hat{\mathbf{M}}\rangle\,\mathbf{H}, \tag{14}$$

где $\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = \sum_i \langle \hat{\mathcal{M}}_i \rangle$ — средний магнитный момент системы (без спиновой части), $\langle U \rangle$ — средняя потенциальная энергия, включающая также обменную энергию, обусловленную симметризацией или антисимметризацией волновой функции тождественных частиц.

Как известно, оператор кинетической энергии системы заряженных частиц в магнитном поле имеет вид [5]

$$\hat{T} = \sum_i m_i \frac{\hat{\mathbf{v}}_i^2}{2},$$

где

$$\hat{\mathbf{v}}_i = \frac{1}{m_i}\left(\hat{\mathbf{P}}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right) — \tag{15}$$

оператор скорости i-й частицы, $\hat{\mathbf{P}}_i = -i\hbar\nabla_i$, $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)$ — вектор-потенциал, связанный с магнитным полем соотношением

$$\mathrm{rot}\, \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}(\mathbf{r}).$$

Обычно на вектор-потенциал накладывается калибровочное условие $\mathrm{div}\, \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$, при котором операторы $\hat{\mathbf{P}}$ и $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ коммутативны. Тогда

$$\hat{T} = \hat{T}_0 - \sum_i \frac{e_i}{m_i c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)\hat{\mathbf{P}}_i + \frac{1}{2}\sum_i \frac{e_i^2}{m_i c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_i), \tag{16}$$

где

$$\hat{T}_0 = \sum_i \frac{\hat{\mathbf{P}}_i^2}{2m_i} = -\hbar^2 \sum_i \frac{\nabla_i^2}{2m_i}. \tag{17}$$

С учетом (6) и (15) оператор магнитного момента i-й частицы описывается формулой

$$\hat{\mathcal{M}}_i = \frac{1}{2}\frac{e_i}{m_i c}[\mathbf{r}_i \hat{\mathbf{P}}_i] - \frac{1}{2}\sum_i \frac{e_i^2}{m_i c^2}[\mathbf{r}_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)]. \tag{18}$$

В однородном магнитном поле вектор-потенциал можно задать в форме [5]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[\mathbf{H}\mathbf{r}]. \tag{19}$$

Подставляя (19) в формулы (16) и (18), находим

$$\hat{T} = \hat{T}_0 - \frac{1}{2}\sum_i \frac{e_i}{m_i c}([\mathbf{r}_i \hat{\mathbf{P}}_i]\,\mathbf{H}) + \frac{1}{8}\sum_i \frac{e_i^2}{m_i c^2}[\mathbf{H}\mathbf{r}_i]^2, \tag{20}$$

$$\hat{\mathbf{M}} = \sum_i \hat{\mathcal{M}}_i = \frac{1}{2}\sum_i \frac{e_i}{m_i c}[\mathbf{r}_i \hat{\mathbf{P}}_i] - \frac{1}{4}\sum_i \frac{e_i^2}{m_i c^2}[\mathbf{r}_i[\mathbf{H}\mathbf{r}_i]]. \tag{21*}$$

Легко видеть, что

$$\hat{\mathbf{M}} = -\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mathbf{H}}. \tag{22}$$

Если теперь подставить (20) и (21) в вириальное соотношение (14) для частиц, взаимодействующих по закону Кулона, мы получим

$$\langle \hat{T}_0 \rangle = -\frac{\langle U \rangle}{2} + \frac{1}{8}\left\langle \sum_i \frac{e_i^2}{m_i c^2}[\mathbf{H}\mathbf{r}_i]^2 \right\rangle. \tag{23}$$

Интересно, что линейные по магнитному полю члены в формуле (23) взаимно сокращаются.

3. Выше мы считали, что частицы взаимодействуют между собой, но на каждую из них не действуют никакие внешние силы, кроме силы Лоренца, и, в частности, отсутствует внешнее давление. Рассмотрим теперь макроскопическую систему, находящуюся под внешним давлением $P \neq 0$. Общая вириальная формула (1) остается справедливой в этом случае, но в ее правую часть следует добавить «вириал стенок», ограничивающих объем макроскопического тела.

Легко показать, что соответствующий дополнительный член равен $\frac{3}{2}PV$ (см., например, [2—4]). Если в правую часть формулы (1) включить «вириал стенок», мы придем к следующему уравнению состояния макроскопической системы в однородном магнитном поле:

$$PV = \frac{1}{3}\left[2\langle \hat{T} \rangle + 2\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle\, \mathbf{H} - \left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \nabla_i U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \ldots \mathbf{r}_N) \right\rangle\right]. \tag{24}$$

*В случае атомов или молекул движением ядер ввиду их большой массы можно пренебречь. Тогда согласно (20) и (21) [5]

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \nabla_i^2 - \frac{e}{2mc}\hat{\mathbf{L}}\mathbf{H} + \frac{1}{8}\frac{e^2}{mc^2}\sum_i [\mathbf{H}\mathbf{r}_i]^2,$$

$$\hat{\mathbf{M}} = \frac{e}{2mc}\hat{\mathbf{L}} - \frac{1}{4}\frac{e^2}{mc^2}\sum_i (\mathbf{H}r_i^2 - \mathbf{r}_i(\mathbf{H}\mathbf{r}_i)),$$

где суммирование проводится по всем электронам, e и m — заряд и масса электрона соответственно, $\hat{\mathbf{L}} = \sum_i \mathbf{r}_i \hat{\mathbf{P}}_i$ — оператор полного орбитального момента. Второй член в выражении для магнитного момента $\mathbf{M}$ связан с диамагнетизмом электронов.

В случае кулоновского взаимодействия между частицами, составляющими систему, уравнение состояния принимает вид

$$3PV = 2\langle\hat{T}\rangle + \langle U\rangle + 2\langle\hat{\mathbf{M}}\rangle\,\mathbf{H}. \tag{25}$$

4. В работе [4] теорема вириала для кулоновского взаимодействия применялась к системе электронов проводимости и ионов в металле при достаточно низких температурах и отсутствии магнитного поля. Согласно [4] в рамках упрощенной модели вырожденного электронного газа, находящегося внутри эффективной потенциальной ямы, создаваемой ионами, средняя кинетическая энергия электронов $\langle T_e\rangle$, средняя потенциальная энергия электронов и ионов $\langle U\rangle$ и химический потенциал электронов μ_e по отношению к вакууму имеют вид:

$$\langle T_e\rangle = \frac{3}{5}\, nVz\, \mathcal{E}_F^{(0)} \left(\frac{n}{n_0}\right)^{2/3}, \tag{26}$$

$$\langle U\rangle = -\frac{6}{5}\, nVz\, \mathcal{E}_F^{(0)} \left(\frac{n}{n_0}\right)^{1/3}, \tag{27}$$

$$\mu_e = \mathcal{E}_F^{(0)} \left[\left(\frac{n}{n_0}\right)^{2/3} - \frac{8}{5}\left(\frac{n}{n_0}\right)^{1/3}\right]. \tag{28}$$

Здесь

$$\mathcal{E}_F^{(0)} = (3\pi^2)^{2/3}\, \frac{\hbar^2}{2m}\, (n_0 z)^{2/3} \text{ —} \tag{29}$$

энергия Ферми при равновесной концентрации ионов n_0, соответствующей нулевому давлению, z — заряд иона, m — масса электрона; n — концентрация ионов в деформированном металле, V — объем тела. При этом давление электронного газа описывается формулой

$$P_e = -\frac{\partial}{\partial V}\,(\langle T_e\rangle + \langle U\rangle) = \frac{2}{5}\, zn\mathcal{E}_F^{(0)} \left[\left(\frac{n}{n_0}\right)^{2/3} - \left(\frac{n}{n_0}\right)^{1/3}\right] \tag{30}$$

и выполняется вириальное соотношение [4]

$$3P_eV = 2\langle T_e\rangle + \langle U\rangle. \tag{31}$$

Мы здесь пренебрегли вкладом кинетической энергии ионов, поскольку эта энергия мала по сравнению с энергией вырожденных электронов. При нулевом давлении электронного газа, когда $n = n_0$, имеем

$$\langle U\rangle = -2\langle T_e\rangle = -\frac{6}{5}\, N_e\, \mathcal{E}_F^{(0)}, \tag{32}$$

(здесь $N_e = n_0 zV$ — полное число электронов проводимости).*

При наличии однородного магнитного поля в рамках той же модели связь между давлением электронного газа, средней кинетической энергией электронов и средней потенциальной энергией электронов и ионов дается формулой (25); при нулевом давлении

$$\langle U\rangle = -2\langle T_e\rangle - 2\langle\mathbf{M}\rangle\,\mathbf{H}, \tag{33}$$

где $\langle\mathbf{M}\rangle$ — средний магнитный момент электронов проводимости, связанный с квантованием их движения в магнитном поле.

Как известно, средний магнитный момент системы при фиксированных давлении и температуре выражается через термодинамический потенциал [2]:

$$\langle\mathbf{M}\rangle = -\left(\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{H}}\right)_{N,\,P,\,T}. \tag{34}$$

При достаточно низких температурах, когда выполнено условие

$$kT \ll \mathcal{E}_F = (3\pi^2)^{2/3}\, \frac{\hbar^2}{2m}\, (nz)^{2/3}, \tag{35}$$

и нулевом равновесном давлении P_e термодинамический потенциал системы «электроны + ионы» совпадает с полной энергией:

$$\phi = \mathcal{E} = \langle T_e\rangle + \langle U\rangle.$$

Средняя потенциальная энергия кулоновского взаимодействия пропорциональна $n^{1/3}$ и при фиксированной концентрации явным образом не зависит от магнитного поля. Таким образом

$$\langle\mathbf{M}\rangle = -\left(\frac{\partial\langle T_e\rangle}{\partial\mathbf{H}}\right)_{N_e,\,n}. \tag{36}$$

Учитывая, что средняя кинетическая энергия зависит только от модуля магнитного поля, но не от его направления, формулу (33) можно переписать в виде

*Давление электронного газа P_e, вообще говоря, может не совпадать с внешним давлением P и, в частности, быть отрицательным. При этом $P = P_e + P_{lat}$, где P_{lat} — давление, обусловленное вкладом связанных, частично коллективизированных электронов (кристаллической решетки). При нулевом внешнем давлении $P_e = -P_{lat}$. В работе [4] предполагалось, что в этом случае $P_e = P_{lat} = 0$.

$$\langle U\rangle = -2\langle T_e\rangle + 2H\left(\frac{\partial}{\partial H}\langle T_e\rangle\right)_{N_e,\,n}, \tag{37}$$

или

$$\langle U\rangle = 2H^2\left(\frac{\partial}{\partial H}\left(\frac{\langle T_e\rangle}{H}\right)\right)_{N_e,\,n}. \tag{38}$$

При отличном от нуля давлении электронного газа вместо (37) и (38) мы должны написать

$$\langle U\rangle = 3P_eV - 2\langle T_e\rangle + 2H\left(\frac{\partial}{\partial H}\langle T_e\rangle\right)_{N_e,\,n}; \tag{39}$$

$$\langle U\rangle = 3P_eV + 2H^2\left(\frac{\partial}{\partial H}\left(\frac{\langle T_e\rangle}{H}\right)\right)_{N_e,\,n}. \tag{40}$$

5. В сильных магнитных полях при условии $kT << \beta H << \mathcal{E}_F$, где $\beta = \dfrac{e\hbar}{2mc}$ — магнетон Бора, T —температура, средняя кинетическая энергия электронов в магнитном поле имеет структуру

$$\langle T_e(N_e,\, n)\rangle = \frac{3}{5}N_e\,\mathcal{E}_F + N_e\,\beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right), \tag{41}$$

где N_e — полное число электронов, а функция f описывается приближенной формулой (см., например, [2,7])

$$f(y) = \frac{1}{4}y + \frac{3}{2\pi^2}y^{3/2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{5/2}}\cos\left(\frac{\pi k}{y} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{42}$$

Из (36) и (42) следует, что магнитный момент электронного газа

$$\langle \mathbf{M}\rangle = -N_e\beta\mathbf{l}\left[f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + \frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)\right] =$$

$$= -N_e\beta\mathbf{l}\left[\frac{1}{2}\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F} + \frac{15}{4\pi^2}\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{3/2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{5/2}}\cos\left(\frac{\pi\mathcal{E}_F}{\beta H}k - \frac{\pi}{4}\right) +\right.$$

$$\left. + \frac{3}{2\pi}\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{1/2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{3/2}}\sin\left(\frac{\pi\mathcal{E}_F}{\beta H}k - \frac{\pi}{4}\right)\right], \tag{43}$$

где $\mathbf{l}$ — единичный вектор в направлении магнитного поля. Первый член в формуле (43) соответствует диамагнетизму Ландау, второй и третий члены — осцилляциям намагниченности де Гааза — ван Альфена*. Поскольку формула (43) применима только при значениях $y = \dfrac{\beta H}{\mathcal{E}_F} << 1$, доминирующую роль в (43) играет третий член, так что осциллирующий магнитный момент

$$\mathbf{M}_{\rm osc} \approx -\mathbf{l}\,\frac{3}{2\pi}\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{1/2}N_e\beta\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{3/2}}\sin\left(\frac{\pi\mathcal{E}_F}{\beta H}k - \frac{\pi}{4}\right). \tag{44}$$

6. Теорема вириала определяет равновесную концентрацию электронов и ионов в металле. Пусть n_0 — равновесная концентрация при нулевом давлении и отсутствии магнитного поля**. Тогда справедливы соотношения (32). В магнитном поле возникают новые условия равновесия: под воздействием поля металл деформируется и концентрации электронов и ионов изменяются. Пользуясь теоремой вириала, оценим изменение концентрации ионов в металле (эффект осцилляторной магнитострикции [6]). Обозначим через $\tilde{n}_0$ новую концентрацию ионов, отвечающую равновесию в магнитном поле при нулевом давлении. В соответствии с формулами (41), (42) кинетическая энергия электронов в магнитном поле будет иметь вид

$$\langle T_e(\tilde{n}_0)\rangle = \frac{3}{5}N_e\,\mathcal{E}_F^{(0)}\left(\frac{\tilde{n}_0}{n_0}\right)^{2/3} + N_e\,\beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\left(\frac{n_0}{\tilde{n}_0}\right)^{2/3}\right). \tag{45}$$

В то же время согласно (27) средняя потенциальная энергия

$$\langle U\rangle = -\frac{6}{5}N_e\,\mathcal{E}_F^{(0)}\left(\frac{\tilde{n}_0}{n_0}\right)^{1/3}. \tag{46}$$

Подставляя (45) и (46) в вириальное соотношение (37), мы приходим к уравнению для n_0:

---

*При достаточно высоких температурах, когда $kT >> \beta H$, но по-прежнему $kT << \mathcal{E}_F$, осцилляции магнитного момента экспоненциально малы. Тогда

$$f(y) = \frac{1}{4}y, \quad \langle \mathbf{M}\rangle = \frac{1}{2}N_e\,\beta^2\mathbf{H}/\mathcal{E}_F.$$

При этом диамагнитная восприимчивость в расчете на единицу объема

$$\chi = -\frac{1}{2}\frac{\beta^2}{\mathcal{E}_F}nz.$$

**Здесь предполагается, что равно нулю как внешнее давление P, так и давление электронного газа P_e.

$$-\frac{6}{5}\,\mathcal{E}_F^{(0)}\left(\frac{\tilde{n}_0}{n_0}\right)^{1/3} = -\frac{6}{5}\,\mathcal{E}_F^{(0)}\left(\frac{\tilde{n}_0}{n_0}\right)^{2/3} +$$

$$+\,2\,\frac{\beta^2 H^2}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\left(\frac{n_0}{\tilde{n}_0}\right)^{2/3} f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\left(\frac{n_0}{\tilde{n}_0}\right)^{2/3}\right), \qquad (47)$$

где

$$f'(y) \equiv \frac{d}{dy} f(y).$$

В рассматриваемых условиях, когда $y = \beta H/\mathcal{E}_F^{(0)} << 1$, относительное изменение концентрации ионов даже в сильных магнитных полях очень мало:

$$|\tilde{n}_0 - n_0|\,/n_0 << 1.$$

Поэтому во втором члене правой части формулы (47) можно положить $\tilde{n}_0 \approx n_0$. В этом приближении находим

$$\frac{\Delta n}{n_0} = \frac{\tilde{n}_0 - n_0}{n_0} = 5\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right)^2 f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right). \qquad (48)$$

Следовательно, относительное изменение объема металла в магнитном поле

$$\frac{\Delta V}{V_0} = -\,5\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right)^2 f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right). \qquad (49)$$

Согласно (42)

$$f'(y) = \frac{1}{4} + \frac{9}{4\pi^2}\,y^{1/2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{5/2}}\cos\left(\frac{\pi k}{y} - \frac{\pi}{4}\right) +$$

$$+\,\frac{3}{2\pi}\,\frac{1}{y^{1/2}}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{3/2}}\sin\left(\frac{\pi k}{y} - \frac{\pi}{4}\right). \qquad (50)$$

При $y << 1$ можно пренебречь в формуле (50) первым и вторым членами по сравнению с третьим. В результате получаем

$$\frac{\Delta V}{V_0} = -\,\frac{15}{2\pi}\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right)^{3/2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{3/2}}\sin\left(\frac{\pi\mathcal{E}_F^{(0)}}{\beta H}k - \frac{\pi}{4}\right). \qquad (51)$$

С учетом (44) формула (51) принимает вид

$$\frac{\Delta V}{V_0} = -\,\frac{\Delta n}{n_0} = \frac{2}{3K_e}\,\frac{\mathbf{M}_{\mathrm{osc}}\mathbf{H}}{V_0}, \qquad (52)$$

где

$$K_e = \frac{2}{15}\,z n_0 \mathcal{E}_F^{(0)} \text{ —} \qquad (53)$$

коэффициент объемной упругости электронного газа в потенциальной яме, создаваемой ионами, вычисленный в работе [4].

Рассмотрим теперь случай $P_e \neq 0$. Обозначим через n равновесную концентрацию при ненулевом давлении P_e и отсутствии магнитного поля, а через $\tilde{n}$ — равновесную концентрацию при том же давлении и $H \neq 0$. С учетом вириального соотношения (31), справедливого при отсутствии магнитного поля, зависимости потенциальной энергии от концентрации ($\langle U\rangle \sim N_e n^{1/3}$) и формулы (45) для кинетической энергии электронов (с заменой $n_0 \to n$, $\tilde{n}_0 \to \tilde{n}$) получаем на основе (39), (40) уравнение для $\tilde{n}$:

$$\left(-\frac{6}{5}\,\mathcal{E}_F + \frac{3P_e}{nz}\right)\left(\frac{\tilde{n}}{n}\right)^{1/3} = -\frac{6}{5}\,\mathcal{E}_F\left(\frac{\tilde{n}}{n}\right)^{2/3} + \frac{3P_e}{\tilde{n}z} +$$

$$+\,2\,\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F}\left(\frac{n}{\tilde{n}}\right)^{2/3} f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\left(\frac{n}{\tilde{n}}\right)^{2/3}\right). \qquad (54)$$

В приближении $\dfrac{\Delta n}{n} = \dfrac{\tilde{n} - n}{n} << 1$ находим

$$\frac{\Delta n}{n} = -\,\frac{\Delta V}{V} = 5\,\frac{(\beta H)^2 f'\left(\dfrac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)}{\mathcal{E}_F\left(\mathcal{E}_F + 10\,\dfrac{P_e}{nz}\right)}. \qquad (55)$$

При $P_e = 0$ формула (55) переходит в (49).

Выражение (55), как и в случае нулевого давления, можно представить в виде

$$\frac{\Delta n}{n} = -\,\frac{\Delta V}{V} = \frac{2}{3}\,zn\,\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F K_e} f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) \qquad (56)$$

или

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{2}{3}\,\frac{\mathbf{M}_{\mathrm{osc}}\,\mathbf{H}}{K_e V}, \qquad (52а)$$

где

$$K_e = \frac{2}{15}\,zn\left(\mathcal{E}_F + 10\frac{P_e}{nz}\right). \qquad (57)$$

Легко убедиться в том, что величина K_e, определенная согласно (57), имеет смысл коэффициента объемной упругости электронно-ионной плазмы в металле при давлении P_e, отличном от нуля. Действительно, из соотношения (30) для давления P_e следует, что коэффициент объемной упругости

$$K_e = n\,\frac{dP_e}{dn} = zn\,\mathcal{E}_F^{(0)}\left[\frac{2}{3}\left(\frac{n}{n_0}\right)^{2/3} - \frac{8}{15}\left(\frac{n}{n_0}\right)^{1/3}\right] = \frac{2}{15}\,zn\mathcal{E}_F + \frac{4}{3}\,P_e,$$

что совпадает с (57). Заметим, что с учетом термодинамического равенства

$$d\mu_e = \frac{1}{zn}\,dP_e \tag{58}$$

результат (57) можно также получить с помощью формулы

$$K_e = zn^2\,\frac{d\mu_e}{dn}, \tag{59}$$

используя выражение (28) для химического потенциала.

В предельном случае очень высоких давлений, когда величина P_e совпадает с давлением вырожденного идеального ферми-газа $\left(P_e = \frac{2}{5}\,zn\mathcal{E}_F\right)$, имеем

$$K_e = \frac{2}{3}\,zn\mathcal{E}_F,$$

$$\frac{\Delta n}{n} = -\frac{\Delta V}{V} = \frac{(\beta H)^2 f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)}{\mathcal{E}_F^2}. \tag{60}$$

Следует подчеркнуть, что результаты (49), (51) и (56) имеют модельный, оценочный характер. В действительности подсистема, состоящая только из ионов и «свободных» электронов проводимости, не является строго замкнутой, и в связи с этим вычисление зависимости концентрации ионов от магнитного поля на основе вириальных формул (37)—(40), примененных к такой системе без учета связанных электронов (кристаллической решетки), не является достаточно точным. Из общих соображений вполне очевидно, что эффект магнитострикции должен быть обратно пропорционален полному коэффициенту объемной упругости K, включающему помимо вклада электронов проводимости K_e также вклад кристаллической решетки ($K = K_e + K_{lat}$). Таким образом, в общем случае

$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{2}{3}\,\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F K}\,znf'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) = -\frac{2}{3}\,\frac{\mathbf{M}_{\mathrm{osc}}\,\mathbf{H}}{KV} \tag{52б}$$

(см. также [6]), т.е. в соотношениях (52) и (56) следует заменить K_e на K.

7. Согласно формулам (45), (46) и (48) при нулевом давлении зависимость средней кинетической энергии электронов и средней потенциальной энергии электронов и ионов от напряженности магнитного поля H и от концентрации ионов n_0 при $H = 0$ описывается выражениями:

$$\langle T_e(N_e, \tilde{n}_0)\rangle = \frac{3}{5}\,N_e\mathcal{E}_F^{(0)} + 2N_e\,\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\,f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right) + N_e\,\beta Hf\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right), \tag{61}$$

$$\langle U(N_e, \tilde{n}_0)\rangle = -\frac{6}{5}\,N_e\mathcal{E}_F^{(0)} - 2N_e\,\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\,f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right). \tag{62}$$

Отсюда с точностью до членов порядка $\left(\frac{\Delta n}{n_0}\right)^2$, которые мы здесь опустили, полная энергия электронов и ионов в магнитном поле при нулевой температуре и нулевом внешнем давлении равна:

$$\mathcal{E}(N_e, \tilde{n}_0) = -\frac{3}{5}\,N_e\mathcal{E}_F^{(0)} + N_e\,\beta Hf\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right). \tag{63}$$

Таким образом, полная энергия в магнитном поле H отличается от полной энергии при $H = 0$ дополнительным членом в выражении (45) для кинетической энергии электронов, взятым при $\tilde{n} \approx n_0$. В соответствии с этим химический потенциал электронного газа по отношению к вакууму дается формулой (ср. с [4])

$$\mu_e = \frac{\mathcal{E}(N_e, \tilde{n}_0)}{N_e} = -\frac{3}{5}\,\mathcal{E}_F^{(0)} + \beta Hf\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right). \tag{64}$$

Величина $W = -\mu$ имеет смысл работы выхода электрона из металла. Мы видим, что дополнительная поправка, описывающая зависимость работы выхода от магнитного поля, очень мала:

$$\frac{\Delta W}{W} = -\frac{5}{2\pi^2}\left(\frac{\beta N}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right)^{5/2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^{5/2}}\cos\left(\frac{\pi\mathcal{E}_F^{(0)}}{\beta H}\,k - \frac{\pi}{4}\right), \tag{65}$$

и, следовательно,

$$|\Delta W| \sim \left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F^{(0)}}\right)^{5/2} W. \tag{66}$$

По-видимому, такие малые осцилляции работы выхода практически невозможно наблюдать (см. в связи с этим [8]). Данный результат не согласуется с оценкой $|\Delta W|/W \sim \left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{3/2}$, содержащейся в книге [7] (п.2.4). Расхождение связано с тем, что в книге [7], так же как и в оригинальной работе [9], при вычислении химического потенциала не учитывалось изменение равновесной концентрации электронов и ионов при включении магнитного поля. Учет осцилляторной магнитострикции приводит к взаимному сокращению членов порядка $\mathcal{E}_F\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{3/2}$ в выражениях для полной энергии и химического потенциала (см. формулы (61)—(64))*. Такая компенсация была ранее отмечена в работе [6].

При $P_e \neq 0$ с учетом (55) кинетическая, потенциальная и полная энергии системы электронов и ионов в металле, выраженные через концентрацию n при $H = 0$, принимают вид

$$\langle T_e(N_e, \tilde{n})\rangle = \frac{3}{5} N_e \mathcal{E}_F + N_e \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + N_e \frac{2(\beta H)^2 f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)}{\mathcal{E}_F + 10\frac{P_e}{zn}},$$

$$\langle U(N_e, \tilde{n})\rangle = -\frac{6}{5} N_e \mathcal{E}_F + 3N_e \frac{P_e}{nz} - \frac{2(\beta H)^2 f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)}{\mathcal{E}_F + 10\frac{P_e}{nz}}\left(1 - \frac{5}{2}\frac{P_e}{nz\mathcal{E}_F}\right), \tag{67}$$

$$\mathcal{E} = -\frac{3}{5} N_e \mathcal{E}_F + 3N_e \frac{P_e}{nz} + N_e \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + 5N_e \frac{P_e}{nz} \frac{(\beta H)^2 f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)}{\mathcal{E}_F\left(\mathcal{E}_F + 10\frac{P_e}{nz}\right)}, \tag{68}$$

---

*В статье [9] даже утверждается, что $|\Delta W|/W \sim \left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{1/2}$. По-видимому, это результат вычислительной ошибки или описки, так как непосредственно из формул, приведенных в работе [9], следует показатель степени $3/2$.

При этом химический потенциал по отношению к вакууму описывается формулой

$$\mu_e = \frac{\mathcal{E}}{N_e} + \frac{P_e}{z\tilde{n}} = -\frac{3}{5}\mathcal{E}_F + \frac{4P_e}{nz} + \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right). \tag{69}$$

Таким образом, изменение химического потенциала

$$\delta\mu = \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right). \tag{70}$$

Мы видим, что и при ненулевом давлении электронного газа выражение для химического потенциала не содержит членов, пропорциональных $f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)$, имеющих величину порядка $\mathcal{E}_F\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{3/2}$: они сокращаются с учетом осцилляторной магнитострикции.

Следует, однако, подчеркнуть, что данный компенсационный эффект имеет место при условии, что упругие свойства металла определяются только электронами проводимости (см. обсуждение после формулы (58)). В общем случае полная энергия электронного газа в магнитном поле при низких температурах имеет структуру

$$\mathcal{E}(N_e, \tilde{n}) = \mathcal{E}_0(N_e, \tilde{n}) + N_e \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\left(\frac{n}{\tilde{n}}\right)^{2/3}\right),$$

где $\tilde{n} = \frac{N_e}{V}$ — концентрация ионов при включении магнитного поля. В соответствии с этим в приближении $|\Delta n| \ll n$ химический потенциал описывается формулой

$$\mu_e = \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial N_e}\right)_V \approx \mu_{e(0)}(\tilde{n}) + \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) - \frac{2}{3}\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F} f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right), \tag{71}$$

где $\mu_{e(0)}(\tilde{n}) = \left(\frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial N_e}\right)_V$ (здесь учтено, что $\mathcal{E}_F \sim N_e^{5/3}$). С учетом равенства (59) имеем

$$\mu_{e(0)}(\tilde{n}) \approx \frac{d\mu_{e(0)}}{dn}\Delta n + \mu_{e(0)}(n) = \mu_{e(0)}(n) + \frac{K_e}{zn^2}\Delta n.$$

Следовательно,

$$\delta\mu_e = \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + \frac{K_e}{zn^2}\Delta n - \frac{2}{3}\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F} f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right). \tag{72}$$

Используя равенство (52б) для отношения $\frac{\Delta n}{n}$, находим

$$\delta\mu_e = \beta H f\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) - \frac{2}{3}\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F} f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)\left(1 - \frac{K_e}{K}\right). \tag{73}$$

Если вкладом кристаллической решетки в коэффициент объемной упругости можно пренебречь ($K_e \approx K$), мы приходим к результату (70); при этом $\delta\mu_e/|\mu_e| \sim \left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right)^{5/2}$. В противоположном предельном случае, когда $K_e \ll K$,

$$\delta\mu_e = -\frac{2}{3}\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F} f'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) = \frac{2}{3}\frac{\mathbf{M}_{\mathrm{osc}}\mathbf{H}}{N_e}. \tag{74}$$

Оценки, содержащиеся в книге [7] и статье [9], соответствуют именно этой ситуации.

8. Мы видим, что теорема вириала позволяет проанализировать условия равновесия электронно-ионной системы в металле при наличии магнитного поля. Естественно ожидать, что при нулевой температуре и нулевом давлении вириальные соотношения должны непосредственно следовать из условия минимума полной энергии, рассматриваемой как функция концентрации n. В случае отсутствия магнитного поля это было показано в работах [4,8]. Пусть теперь магнитное поле $H \neq 0$. Представим кинетическую энергию электронов в магнитном поле в виде

$$\langle T_e\rangle = N_e \beta H g\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right), \tag{75}$$

где в соответствии с (45)

$$g(y) = \frac{3}{5}\frac{1}{y} + f(y), \qquad \beta = \frac{e\hbar}{2mc}.$$

Подставляя (75) в вириальную формулу (38), получаем

$$\langle U\rangle = 2\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F} N_e g'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right), \tag{76}$$

где

$$g'(y) \equiv \frac{dg(y)}{dy}.$$

С другой стороны, средняя потенциальная энергия системы частиц, взаимодействующих по закону Кулона, зависит от концентрации, как $n^{1/3}$. Поэтому полная энергия имеет структуру

$$\mathcal{E} = N_e \beta H g\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + CN_e n^{1/3}. \tag{77}$$

Поскольку $\mathcal{E}_F \sim n^{2/3}$, из условия минимума

$$\left(\frac{\partial\mathcal{E}(n, H, N_e)}{\partial n}\right)_{H, N_e} = 0 \tag{78}$$

следует, что при равновесии выполняется равенство

$$-\frac{2}{3}N_e\frac{(\beta H)^2}{n\mathcal{E}_F} g'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + \frac{1}{3n}\langle U(N_e, n)\rangle = 0, \tag{79}$$

где $\langle U(N_e, n)\rangle = CN_e n^{1/3}$. Легко видеть, что формулы (76) и (79) полностью эквивалентны.

Если давление $P_e \neq 0$, то соответствующее вириальное соотношение (40) следует из условия минимума термодинамического потенциала

$$\phi = \beta H N_e g\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + CN_e n^{1/3} + N_e\frac{P_e}{nz}. \tag{80}$$

Действительно, равенство

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_{N_e, H, P_e} = 0 \tag{81}$$

дает

$$\langle U(N_e, n)\rangle = 2\frac{(\beta H)^2}{\mathcal{E}_F} N_e g'\left(\frac{\beta H}{\mathcal{E}_F}\right) + 3\frac{N_e P_e}{nz}. \tag{82}$$

Такое же соотношение получается, если подставить в формулу (40), в которой объем $V = \frac{N_e}{nz}$, выражение (75).

Автор выражает глубокую благодарность М.И.Подгорецкому за интерес к работе и полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Механика. М.: Наука, 1988, §10.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Статистическая физика. М.: Наука, 1976, ч.1, §§ 31, 52, 60.
3. Гирфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р. — Молекулярная теорема жидкостей и газов. М.: ИЛ, 1961, гл.3, §1.
4. Васильев Б.В., Любошиц В.Л. — УФН, 1994, т.164, №4, с.367.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989, §111.

6. Алексеевский Н.Е., Нижанковский В.Н. — ЖЭТФ, 1985, т.88, с.1771.
7. Шенберг Д. — Магнитные осцилляции в металлах. М.: Мир, 1986, гл.2,4.
8. Васильев Б.В., Каганов М.И., Любошиц В.Л. — УФН, 1994, т.164, №4, с.375.
9. Каганов М.И., Лифшиц И.М., Синельников К.Д. — ЖЭТФ, 1957, т.32, с.605.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 июня 1996 года.

Любошиц В.Л. Р4-96-221
Теорема вириала и условия равновесия
системы заряженных частиц в магнитном поле

Анализируются следствия теоремы вириала для системы взаимодействующих друг с другом заряженных частиц, находящихся во внешнем магнитном поле. На основе теоремы вириала в рамках модели вырожденного электронного ферми-газа, находящегося внутри потенциальной ямы, создаваемой ионами, исследуются условия равновесия электронов и ионов в металле при наличии магнитного поля. Проведены оценки объемной деформации металла в сильном магнитном поле (эффект осцилляторной магнитострикции) и магнитных осцилляций работы выхода электронов из металла. Рассмотрена связь вириальных соотношений для равновесной системы электронов и ионов при низких температурах с условием минимума термодинамического потенциала (или полной энергии при нулевом давлении).

Работа выполнена в Лаборатории высоких энергий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1996

Lyuboshitz V.L. P4-96-221
The Virial Theorem and the Conditions of Equilibrium
of a System of Charged Particles in the Magnetic Field

The consequences of the virial theorem are analyzed for the system of mutually interacting charged particles located in an external magnetic field. The conditions of equilibrium of electrons and ions in a metal in the presence of the magnetic field are investigated on the base of the virial theorem in the framework of the model of the degenerate Fermi-gas, being in a potential well produced by ions. The estimates of the volume deformation of a metal in a strong magnetic field (the oscillation magnetostriction effect), and those of magnetic oscillations of the electron work of exit from a metal are performed. The connection between virial relations for an equilibrium system of electrons and ions at low temperatures and the condition of the minimum of the thermodynamic potential (or the total energy at zero pressure) is considered.

The investigation has been performed at the Laboratory of High Energies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1996