

ЖАРАТЫЛЫСТАНУ ҒЫЛЫМДАР / ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ /
NATURAL SCIENCES

DOI 10.54596/2309-6977-2022-2-7-16

УДК 531

МРНТИ 01.02.04

АТОМНЫҢ ТОМАС-ФЕРМИ МОДЕЛІ ҮШІН ӨЛШЕМСІЗ ТОМАС-ФЕРМИ
ТЕҢДЕУІН АЛУ

Калдыбек Ф.Н., Спивак-Лавров И.Ф.

(e-mail: fatima-96@inbox.ru, spivakif@rambler.ru)

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

Аңдатпа

Берілген мақалада электронды-бейтарап атомдар жиынының мәндерінің энергияларын есептеу әдісі берілген. Бұл жағдайда ядроның кулондық байланысынан өзге электрондардың өзара әрекеттесуі энергияға маңызды үлес қосады. Аталған өзара әрекеттесулер Томас-Фермидің статистикалық моделі аясында жуықтау ілімін енгізумен таралуын өзін-өзі түзету өрісі әдісімен сандық есептеу, әсіресе қиын атомдар үшін айтарлықтай тиімсіз. Дегенмен күрделі атомдар үшін жуықтау әдісі көрсетіледі және оның мәні оның қарапайымдылығында жатыр. Бірдей бөлшектердің көптігінен тұратын жүйелерге арналған түрлі әдістердің арасында атомның Томас-Ферми статистикалық моделінен шығатын статистикалық әдіс маңызды рөл атқарады. Бұл әдіс (Э. Ферми, Л. Томас, 1927) электрондары көп күрделі атомдарда электрондардың көпшілігінде салыстырмалы түрде үлкен квант сандары болатындығына негізделген. Бұл жағдайда жартылай классикалық жуықтау қолданылады. Нәтижесінде атомның жеке электрондарының күйі үшін «фазалық кеңістіктегі жасушалар» ұғымын қолдануға болады. Бұл модель зерттеушілермен ұзақ мерзімді уақыт бағытында әзірленді және бұрынғы үлгілерді ақаулары жоқ дәйекті, толық ілімге әкелді, мысалы, оны қолдану аймағы бастапқы Томас-Фермиге қарағанда кеңірек болып табылады.

Түйін сөздер: атом деңгейінің энергиясы, Томас - Ферми моделі, жуықтау теориясы, Амальди түзетуі.

ВЫВОД БЕЗРАЗМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ТОМАСА-ФЕРМИ ДЛЯ МОДЕЛИ
АТОМА ТОМАСА-ФЕРМИ

Калдыбек Ф.Н., Спивак-Лавров И.Ф.

(e-mail: fatima-96@inbox.ru, spivakif@rambler.ru)

Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актөбе, Казахстан

Аннотация

В данной статье представлен метод расчета энергий значений множества электронно-нейтральных атомов. В этом случае существенный вклад в энергию вносит взаимодействие электронов, отличных от кулоновской связи ядра. Эти взаимодействия обеспечиваются введением теории возбудимости в рамках статистической модели Томаса-Ферми. Между иных способов для систем, состоящих из большого количества схожих частиц, весомую роль играет статистический способ, базирующийся на статистической модели Томаса — Ферми атома. Данный способ (Э. Ферми, Л. Томас, 1927) реализован на том, собственно что в многоэлектронных электронах основная масса электронов имеют сравнительно гигантские квантовые количества.

В данном случае применяется квазиклассическое приближение. В следствие этого мы можем использовать понятие «ячейки в фазовом пространстве» к состоянию отдельных электронов атома. Данная модель разрабатывалась исследователями в направлении долговременного времени и доведена до непротиворечивой, завершённой доктрине, свободной от дефектов прошлых моделей, например, собственно что район ее использования важно обширнее, чем начальная доктрина Томаса-Ферми.

Ключевые слова: энергия атомного уровня, модель Томаса-Ферми, теория возмущений, поправка Амальди.

DERIVATION OF THE DIMENSIONAL THOMAS-FERMI EQUATION FOR THE THOMAS-FERMI ATOM MODEL

Kaldybek F.N., Spivak-Lavrov I.F.

(e-mail: fatima-96@inbox.ru, spivakif@rambler.ru)

Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan

Abstract

This article presents a method for calculating the energies of the values of the set of electron-neutral atoms. In this case, the interaction of electrons other than the Coulomb bond of the nucleus makes an important contribution to energy. Quantitative calculation of the interaction of these interactions with the introduction of the theory of approximation in the framework of the Thomas-Fermi statistical model by the method of self-correction field is particularly inefficient for complex atoms. However, for complex atoms, the method of approximation is shown, and its essence lies in its simplicity. Among the various methods for systems consisting of the same number of particles, the statistical method derived from the Thomas-Fermi statistical model of the atom plays an important role. This method (E. Fermi, L. Thomas, 1927) is based on the fact that in complex atoms with a large number of electrons, most electrons have relatively large quantum numbers. In this case, a semi-classical approximation is used. As a result, the concept of "cells in phase space" can be used for the state of the individual electrons of the atom. This model has been developed by researchers over a long period of time and has led to a consistent, complete doctrine without the defects of previous models, for example, its field of application is wider than the original Thomas-Fermi.

Keywords: atomic energy, Thomas-Fermi model, approximation theory, Amaldi's correction.

Кіріспе

Кванттық механиканың алғашқы күндерінен бастап физикалық қызықты жүйелердің көпшілігін, әсіресе бөлшектері көп жүйелерді дәл шешуге үміттенуге болмайтыны анық болды. Осылайша, 1930 жылға қарай (Томас және Ферми алғашқы шығармаларынан үш жылдан кейін ғана) және «жаңа» кванттық теория пайда болғаннан кейін бес жыл өткен соң) сызықтық емес талдаулар үшін шамамен аналитикалық шешімдерді құру үшін жуықтау әдістерінің үлкен әртүрлілігі әзірленді.

Томас-Ферми теңдеуі – атомның электрондарын модельдеуге арналған сызықты емес қарапайым дифференциалдық теңдеу. Атап айтқанда, Томас-Ферми моделі ядролық физикада мысалы, нейтрондық жұлдыздардағы ядролық затқа байланысты сұрақтарға жауап беру үшін кеңінен қолданылады. Бұл модельдің мақсаты – электрон тығыздығы $\rho(r)$ үшін өрнек беру және, әрине, бұл үшін r қашықтықтағы электрондар бұлты мен ядро арасындағы электростатикалық потенциалды анықтау. Бұл орталық потенциал $\Phi(r)$ Ферми-Дирак статистикасына бағынатын электрондардың аймақ өлшеміне қарай айтарлықтай өзгермейтін үлкен деп саналатын көлем аймағындағы өзара әрекеттесуінде үстемдік етеді. Бұл жағдайда электрондар еркін қозғалады. Ал электронның кинетикалық энергиясы минималды болады, сондай-ақ электрондар алып тастау принципіне сәйкес фазалық кеңістікте мүмкіндігінше тығыз орналасқан.

Импульсі p -дан аз электрондарға сәйкес келетін фазалық кеңістіктің көлемі және физикалық кеңістік dV көлемінің элементінде орналасқан $\frac{4}{3}\pi p^3 dV$ -ға тең. Бұл $\frac{4\pi p^3 dV}{3(2\pi)^3}$ көлем ұяшықтарға сәйкес келеді, яғни артық емес ықтимал күйлеріне электрондар (әр ұяшықта өзара қарама-қарсы спиндері бар екі электрон бар) сәйкес келеді:

$$2 \frac{4\pi p^3}{3(2\pi)^3} dV = \frac{p^3}{3\pi^2} dV \quad (1)$$

Атомның қалыпты күйінде dV көлемнің әрбір элементінде орналасқан электрондар импульске сәйкес ұяшықтарды (фазалық кеңістікте) нөлден кейбір максималды мәнге дейін толтыруы керек. Сонда электрондардың кинетикалық энергиясы әрбір нүктеде мүмкіндігінше аз болады.

Электрондардың кинетикалық энергиясы әрбір нүктеде мүмкіндігінше аз болады. Егер dV көлемдегі электрондар санын ndV (мұндағы электрондар санының тығыздығы) түрінде жазсақ, онда әрбір нүктедегі p_0 электрон импульсінің максималды мәні n қатынасы арқылы байланысты екенін дәлелдеуге болады.

$$\frac{p_0^3}{3\pi^2} = n. \quad (2)$$

Электрон тығыздығы n -ға тең жердегі электронның кинетикалық энергиясының ең үлкен мәні, сәйкесінше келесі мәнге ие болады:

$$\frac{p_0^2}{2} = \frac{1}{2} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (3)$$

Әрі қарай, $\varphi(r)$ - шексіздікте нөлге тең қабылдайтын электростатикалық потенциал болсын. Электронның толық энергиясы $p^2/2 - \varphi$ түрінде жазылады. Әлбетте, әрбір электронның толық энергиясы теріс болуы керек; әйтпесе электрон шексіздікке барады. Әрбір нүктедегі электронның толық энергиясының ең үлкен мәнін $-\varphi_0$ арқылы белгілейік, мұндағы φ_0 - оң тұрақты (егер бұл шама тұрақты болмаса, электрондар φ_0 аз нүктеден φ_0 көп нүктеге ауысар еді). Осылайша, келесі өрнекті

$$\frac{p_0^2}{2} = \varphi - \varphi_0 \quad (4)$$

ретінде жаза аламыз. (3) және (4) өрнектерді теңестіріп, аламыз:

$$n = [2(\varphi - \varphi_0)]^{3/2} \frac{1}{3\pi^2} \quad (5)$$

– атомның әрбір нүктесіндегі электронның тығыздығы мен потенциалына қатысты қатынасы. [4].

$\varphi = \varphi_0$ кезінде, тығыздық n жоғалады; $\varphi < \varphi_0$ аймақта n нөлге тең болуы анық және (4) қатынасы теріс максималды кинетикалық энергияға әкеледі. Сонымен $\varphi = \varphi_0$ атомның шекарасы теңдеу арқылы анықталады. Бірақ жалпы заряды нөлге тең зарядтардың орталықтандырылған симметриялық таралуынан тыс өріс жоқ. Сондықтан бейтарап атомның шекарасында болуы $\varphi = 0$ керек. Осыдан бейтарап атом үшін тұрақты φ_0 нөлге тең болуы керек деген қорытынды шығады. Керісінше, ион үшін тұрақты φ_0 нөлден өзгеше болады [1].

Төменде біз бейтарап атомды қарастырамыз және сәйкесінше $\varphi_0 = 0$. электростатикалық Пуассон теңдеуіне сәйкес $\Delta\varphi = 4\pi$ мәніне ие болады; мұнда (5) орнына қойып, негізгі Томас-Ферми теңдеуін аламыз:

$$\Delta\varphi = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \varphi^{3/2} \quad (6)$$

Атомның қалыпты күйіндегі өрістің таралуы осы теңдеудің орталық симметриялы шешімімен анықталады, ол келесі шекаралық шарттарды қанағаттандырады: $r \rightarrow 0$ кезінде өріс ядроның кулондық өрісіне өтуі керек, яғни ол $\varphi r \rightarrow Z$ болуы керек, $r \rightarrow \infty$ кезінде $\varphi r \rightarrow 0$ болуы керек. Анықтамаларға сәйкес r айнымалының орнына X жаңа айнымалыны енгіземіз:

$$r = xbZ^{-1/3}, b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} = 0,885 \quad (7)$$

және φ жаңа белгісіз функцияның орнына χ -тен тәуелді функцияны енгізе отырып:

$$\varphi(r) = \frac{Z}{r} \chi \left(\frac{rZ^{1/3}}{b} \right) = \frac{Z^{4/3}}{b} \frac{\chi(x)}{x} \quad (8)$$

$\chi = 1$ және $x = 1$, $\chi = 0$ кезіндегі шекаралық шарттармен келесі теңдеуді аламыз:

$$x^{1/2} \frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \quad (9)$$

Бұл теңдеу енді ешқандай параметрлерді қамтымайды және осылайша $\chi(x)$ әмбебап функцияны анықтайды. Төмендегі 1-кестеде (9)-теңдеуді сандық интегралдау арқылы алынған функция $\chi(x)$ мәндері көрсетілген [5].

1 -кесте . $\chi(x)$ функция мәндері

X	$\chi(x)$	X	$\chi(x)$	X	$\chi(x)$
0,00	1000	1.4	0,333	6	0,0594
0,02	0,942	1.6	0,298	7	0,0461
0,04	0,947	1.8	0,268	8	0,0366
0,06	0,924	2.0	0,243	9	0,0296
0,08	0,902	2.2	0,221	10	0,0243
0,10	0,882	2.4	0,202	11	0,0202
0.2	0,793	2.6	0,185	12	0,0171
0.3	0,721	2.8	0,170	13	0,0145
0.4	0,660	3.0	0,157	14	0,0125
0.5	0,607	3.2	0,145	15	0,0108
0.6	0,561	3.4	0,134	20	0,0058
0.7	0,521	3.6	0,125	25	0,0035
0.8	0,485	3.8	0,116	30	0,0023
0.9	0,453	4.0	0,108	40	0,0011
1.0	0,424	4.5	0,0919	50	0,00063
1.2	0,374	5.0	0,0788	60	0,00039

Функция $\chi(x)$ монотонды түрде азаяды, тек шексіздікте жойылады. Басқаша айтқанда, Томас-Ферми моделінде атомның шекарасы жоқ, бірақ формальды түрде шексіздікке дейін созылады.

$x = 0$ кезіндегі $\chi'(x)$ туынды мәні $\chi'(0) = -1,59$ тең. Сондықтан, функцияның $x \rightarrow 0$ мәні $\chi(x)$ болады және сәйкесінше $\varphi(r)$ потенциалы келесі мәнге ие:

$$\varphi(r) \approx \frac{Z}{r} - 1,80 \cdot Z^{4/3} \quad (10)$$

Бірінші мүше – ядро өрісінің потенциалы, ал екіншісі – координаталар басындағы электрондардың құрған потенциал. (5) орнына (8) қойып, электрон тығыздығы үшін келесі түрдегі өрнекті жазамыз:

$$n = Z^2 f\left(\frac{rZ^{1/3}}{b}\right), \quad f(x) = \frac{32}{9\pi^3} \left(\frac{\chi}{x}\right)^{3/2} \quad (11)$$

Біз Томас-Ферми моделінде әртүрлі атомдардағы заряд тығыздығының таралуы ұқсас болатынын көреміз, бұл ретте сипаттамалық ұзындық $\hbar^2/me^2 Z^{1/3}$ (шартты бірліктерде: $Z^{-1/3}$ яғни $Z^{1/3}$ -ге бөлінген Бор радиусы) параметрінің рөлі орындалады. Егер арақашықтықтар атомдық бірліктермен өлшенсе, онда, атап айтқанда, электрон тығыздығы максималды болатын қашықтықтар барлық Z үшін бірдей болады. Сондықтан Z саны бар атомдағы электрондардың көпшілігі $Z^{-1/3}$ дәрежелі ядродан қашықтықта орналасқан деп дәлелдеуге болады. Сандық есептеу атомның жалпы электрондық зарядының жартысы радиусы $1,33 Z^{-1/3}$ сфераның ішінде екенін көрсетеді.

Осыған ұқсас пайымдаулар атомдағы электрондардың орташа жылдамдығы (энергияның квадрат түбірі ретінде шама ретімен қарастырылады) $Z^{2/3}$ ретті екенін көрсетеді.

Томас-Ферми теңдеуі ядродан тым аз және тым үлкен қашықтықта да қолданылмайды. Оның кішігірім үшін қолдану ауқымы r теңсіздікпен шектеледі; ядроның кулондық өрісіндегі кішірек қашықтықта жартылай классикалық жуықтау жарамсыз болып қалады. $a=Z$ деп алсақ, қашықтықтардың төменгі шегі ретінде $1/Z$ мәнін табамыз. Жартылай классикалық жуықтау күрделі атомда r үлкен үшін де жарамсыз болып қалады. Дәлірек айтқанда, $r \sim 1$ болғанда электронның де Бройль толқын ұзындығы осы қашықтықтың өз тәртібіне айналатынын көру оңай, осылайша жартылай классикалық шарт толығымен бұзылады. Мұны (4), (6) теңдеу мүшелерін бағалау арқылы тексеруге болады; дегенмен нәтиже алдын ала, есептеулерсіз де анық, өйткені (6) теңдеуде Z жоқ. Осылайша, Томас-Ферми теңдеуінің қолданылуы 1-мен салыстырғанда үлкен $1/Z$ және 1-мен салыстырғанда аз қашықтықтардың диапазонымен шектеледі, күрделі атомдарда бұл аймақ электрондардың үлкен бөлігін қамтиды.

Соңғы жағдай Томас-Ферми моделіндегі атомның "сыртқы шекарасы" $-r \sim 1$ жағдайында екенін білдіреді, яғни атомдардың өлшемдері Z -ге тәуелді емес. Олармен бірге сыртқы электрондардың энергиясы, яғни атомның иондану потенциалы да Z -тан тәуелді емес болып шығады.

Томас – Ферми әдісін қолдана отырып, E толық иондану энергиясын (бейтарап атомнан барлық электрондарды шығаруға қажетті энергия) есептеуге болады. Ол үшін

атомдағы зарядтар үшін Томас-Ферми таралуының электростатикалық энергиясын есептеу керек, ағымдағы жалпы энергия осы электростатикалық энергияның жартысына тең болады, өйткені Кулон заңына сәйкес әрекеттесетін бөлшектер жүйесінде орташа кинетикалық энергия орташа потенциалдық энергияның минус жартысына тең [6,7] .

Е-нің Z -ге тәуелділігін алдын ала анықтауға болады: ядродан орташа қашықтықта орналасқан Z заряды бар ядро өрісіндегі электрондардың Z электростатикалық энергиясы $Z^{-1/3}$ мәніне пропорционал. Сандық $Z \cdot Z / Z^{-1/3} = Z^{7/3} \varepsilon B$ есептеу келесі нәтижеге әкеледі: $E = 20,8 Z^{7/3} \varepsilon B$. Z -ге тәуелділік эксперименттік мәліметтермен жақсы сәйкес келеді; коэффициенттің эмпирикалық мәні 16-ға жақын болады.

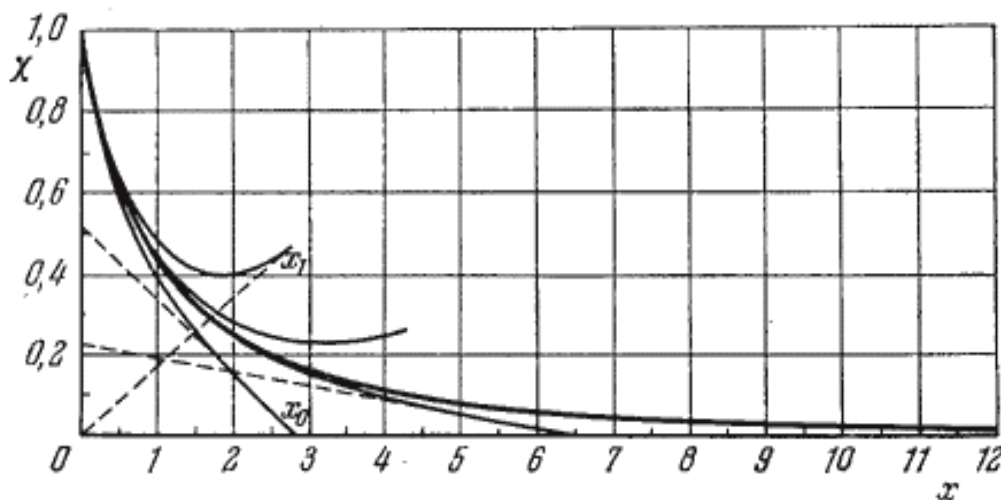
X_0 мәні иондану дәрежесімен келесі түрде байланысты: радиусы r шардағы толық заряд Гаусс теоремасы бойынша мынаған тең:

$$-r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} = Z[\chi(x) - x\chi'(x)] \quad (12)$$

Егер (12) формулаға $X = X_0$ мәнін қойсақ, $\chi(x_0) = 0$ болғандықтан, Z ионының толық заряды шығады.

$$z = -Zx_0\chi'(x_0) \quad (13)$$

Төмендегі 1-суреттегі қалың сызық бейтарап атом үшін қисықты көрсетеді, ал оның астында $\chi = \chi(x)$ иондану дәрежесі әртүрлі иондар үшін екі қисықты көрсетеді. Графикалық түрде y осінен z/Z нүктедегі қисыққа $x = x_0$ жанама арқылы кесілген сегменттің ұзындығымен көрсетілген.



1-сурет. Бейтарап атом үшін $\chi = \chi(x)$ қисығы

(9)-теңдеудің еш жерде жойылмайтын шешімдері де бар, шексіздікте бұл шешімдер алшақтайды. Оларды φ_0 тұрақтының теріс мәндеріне сәйкес деп санауға болады. Сол 1-

суретте осындай $\chi = \chi(x)$ екі қисықты көрсетеді; олар бейтарап атом үшін қисық сызықтан өтеді. $x = x_1$ нүктесінде

$$\chi(x_1) - x_1 \chi'(x_1) = 0, \quad (14)$$

$x < x_1$ шардың ішінде қамтылған жалпы заряд нөлге тең болады (графикалық түрде бұл нүкте қисыққа жанама координат басынан өтетін нүкте екені анық). Осы нүктеде қисық сызықты үзіп, $\chi(x)$ оның шекарасында заряд тығыздығы нөлге тең емес күйде қалатын бейтарап атом үшін анықталатынын айта аламыз. Физикалық тұрғыдан алғанда, бұл белгілі бір шекті көлемдегі «қысылған» атомға сәйкес келеді.

Томас-Ферми теңдеуі электрондар арасындағы алмасу әрекетін есепке алмайды. Онымен байланысты әсерлер келесі шама $Z^{-2/3}$ ретімен сәйкес келеді. Сондықтан Томас-Ферми әдісінде алмасу әрекеттесуін есепке алу осы реттің барлық әсерлерін бір уақытта қарастыруды талап етеді [8].

Әрбір электронға әсер ететін Томас-Ферми моделінің орташа потенциалын пайдалану электронды аралық әсерлесуді шамамен есепке алуға және атомдық деңгейлердің энергиясын жақсы сипаттауға мүмкіндік береді. Томас-Ферми әдісін қолдану есептердің дәлдігін шектейді. Дегенмен, ұсынылған тәсілде атомдық деңгейлердің энергиялары үшін қарапайым аналитикалық өрнектер алынды, бұл күрделі есептеулерді қажет ететін басқа тәсілдермен салыстырғанда айтарлықтай артықшылық болып табылады. Томас-Фермидің статистикалық моделі электронның толқын ұзындығының ретті қашықтықтағы потенциалы салыстырмалы түрде өзгертін көлемде электрондардың көп саны болуы үшін біршама баяу өзгереді деген болжамға негізделген. Ұсынылған әдістің анағұрлым жалпы әдістен айырмашылығы электрондар саны көп аймақтағы энергиялардың практикалық тұрақтылығы туралы қосымша болжам болып табылады [2].

Томас-Ферми моделінің кейбір кемшіліктері бар. Баға электропилканың электростатикалық өзіндік энергиясын да есепке алғанымен, ол өзара әрекеттесу алмасуын және электробөлшектердің корреляциясын көрсетпейді. Бұл кемшіліктер бейтарап Томас-Ферин атомының жұп аймақтарында ядродан үлкен қашықтықта электрондардың тығыздығы p нөлге тым баяу төмендейтінін ($1/r^6$ заңы бойынша) және шекара радиусы $x_0 = \infty$ тең болатынын түсіндіреді. Шамамен $r = 3a_0$ -дан бастап аргон атомының электрон тығыздығының қисығы неғұрлым жоғары болған сайын, соғұрлым фокустағы электронды тығыздық дәл анықталады. Осы кемшіліктерді жою үшін бастапқы Томас-Формле үлгісі жетілдіріліп, толықтырылды. Төменде осы толықтыруларды қысқаша қарастырамыз.

Ленц пен Йенсендік түзету. Ядродан үлкен қашықтықтағы тығыздықтың тым баяу төмендеуін Ленц пен Йенсен түзеді. Ол үшін p тығыздығының жүрісі вариация принципінен яғни A минимум талабынан тікелей анықталды, ал ядродан үлкен қашықтықта экспоненциалды ыдырау талабы p мәніне қойылды.

Йенсен ядродан үлкен қашықтықта алыстау кезінде Хартри шешімімен толық сәйкес келетін жуықтау шешімін алды. Алайда, бұл шешімге тек жартылай эмпирикалық мән берілуі мүмкін, өйткені $r = \infty$ кезінде жиынтық мән үшін экспоненциалды ыдырау талабы атомның сыртқы аймақтарындағы электрондардың тығыздығымен анықталмайды, сондықтан соңғы жасалған болжамдарға байланысты Ленц-Йенсен әдісі теріс иондардың тұрақтылығын түсіндіруге мүмкіндік береді.

Алмасу түзетуі. Алмасу түзетуін алғаш рет статистикалық модельге Дирак енгізді. Йенсеннің пікірінше, бұл түзетуді енгізудің ең қарапайым тәсілі энергия өрнегінде интеграл астындығы бос электрон газының алмасу энергиясының тығыздығымен толықтыру болып табылады.

Ферми мен Амальди түзетуі. $\Delta^2\Phi = 4\pi en(r)$ теңдеуінің орнына келесі теңдеуді жаза отырып:

$$\Delta^2\Phi = 4\pi e \frac{Z-1}{Z} n(r) \quad (15)$$

аламыз.

Мұндағы Φ ядро мен $Z-1$ электроны жасаған және (15) теңдеудің оң жақ бөлігіне қосылмаған Z электронды санына әсер ететін потенциалды білдіреді. Осы жеңілдетілген тәсілмен сынақ ретінде қандай электронды қарастыратынымыз маңызды емес. Алайда бұл статистикалық суреттің дәлдік сипаттамасына толық сәйкес келеді. Шекаралық шарт $r \rightarrow 0$ ядро зарядымен анықталады, сондықтан өзгеріссіз қалады:

$$r \rightarrow 0 \text{ кезінде } \Phi(r) = \frac{Ze}{r} \quad (16)$$

бейтарап атомның шекарасында енді

$$\Phi(R) = \frac{e}{R} \cdot \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)_R = -\frac{e}{R^2} \quad (17)$$

болуы керек, өйткені бұл жағдайда e бір оң ядролық заряд $Z-1$ электронмен экрандалмаған болып табылады және біз сынақ ретінде қарастыратын электронға әрекет етуді жалғастырады.

Кванттық статистикадан шығатын басқа негізгі теңдеу де сол пішінге ие, сондықтан біз теңдеуді қайтадан жаза аламыз.

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \{2me[\Phi(r) - \Phi(R)]\}^{3/2} \quad (18)$$

$n(r)$ функцияны жою арқылы және қайтадан өлшемсіз функцияны енгізу арқылы

$$\varphi = \frac{r}{Ze} [\Phi(r) - \Phi(R)] \quad (19)$$

бұрынғы әмбебап дифференциалдық теңдеуді аламыз. Онда өлшемсіз тәуелсіз айнымалы енді $x = r/\bar{a}$ қатынасымен анықталады, және $\bar{a}$

$$\bar{a} = a \left(1 - \frac{1}{Z} \right)^{-2/3} \quad (20)$$

және $\varphi(x)$ функциясы үшін келесі шарттар былай жазылады:

$$\varphi(X) = 0 \quad \text{и} \quad X\varphi'(X) = \frac{1}{Z} \quad (21)$$

Бұл шарттарды атом радиусының соңғы мәндерінде ғана қанағаттандыруға болады, бұл $\bar{a}$ мәнімен байланысты атомның таралу әсерін өтейді [10].

Ферми және Амальди түзетуі бейтарап атом мен оң иондардың шекаралық аймақтарындағы электрондардың электростатикалық өзіндік энергиясын өте қанағаттанарлық түрде түзетеді. Алайда ион мен атомның ішкі аймақтары үшін бұл түзету өте өрескел болып табылады. Ферми Амальди түзетуінің нәтижесінде бейтарап атомдардың радиусы оң иондар сияқты шекті болады, ал қарапайым теріс иондарда олардың электронды тығыздығы Томас-Ферми үлгісіндегі бейтарап атом сияқты

шексіздікке дейін созылады және тұрақты болады. Оң иондардың радиусы түзету нәтижесінде Томас Фермидің бастапқы статистикалық иондарынан кіші болады.

Қорытынды

Ауыр атомдардағы электрон тығыздығының таралуын есептеу үшін алғаш рет статистикалық Томас-Ферми әдісі қолданылды. Статистикалық модельдің электрондық орналасуы асыл газдардың электронды конфигурациясына ұқсас газ атомдарындағы электрондардың сфералық симметриялы таралуында оңтайлы жуықтауды береді. Нақты уақытта бұл әдіс барлық дерлік бөлшектері (молекулалар, кристалдар, атом ядролары) бар басқа жүйелерде сәтті жүзеге асырылады. Статистикалық модельдің электрондық орналасуы асыл газдардың электрлік құрылымына ұқсас газ атомдарындағы электрондардың сфералық симметриялық дисперстілігіне қолайлы жуықтауды көрсетеді.

Бұл әдіс валенттік электрондары бар атомдардағы электрондардың таралуын сипаттау үшін жарамсыз (мысалы бір валентті калий атомы), сол себепті статистикалық әдіс ретінде оның орналасуын көрсету мүмкін емес. Статистикалық әдіс, атомдардағы нақты дисперстіліктің орташа мағынасын ғана бөліп көрсетеді және электрондық қабаттардың құрылымын қарастырмайды. Барлық ықтимал статистикалық таралуды салыстыру, шын мәнінде, атомдардың немесе иондардың ішкі аймақтарында олар атомның сыртқы аймақтарында тура мағынада ұқсас екендігін көрсетеді, бірақ маңызды айырмашылықтар да бар екенінде айқындайды. Бастапқы Томас-Ферми моделінде электронның тығыздығы ядродан үлкен қашықтықта өте баяу азаяды, нәтижесінде электрондар өздігінен үйлесімді өрісте таралады.

Модельдің бұл кемшілігі маңызды (бірақ толық емес) Ферми-Амальди түзетуі арқылы жойылады. Алмастыруды түзетуді ескере отырып, тығыздықтың ең жақсы таралуының маңызды бірі алынады, ол корреляцияға тәуелді түзетуді енгізу арқылы одан сайын нақтыланады. Бұл түзетулер әлі де атомдар мен иондардың сыртқы аймақтары үшін нақты таралудың негізделген орташа таралуын көрсетеді, шын мәнінде бұл Томас Ферми немесе

Ферми-Амальдидің түзетулерімен анықталған атомдар немесе иондардың сезімталдығы үшін айтарлықтай жақсы нәтижелер алынады.

Әдебиет:

1. Байков Ю.А., Кузнецов В.Н. Квантовая механика. М.: Бином, 2015. – 291 с.
2. Бекман И.Н. Атомная и ядерная физика: радиоактивность и ионизирующие излучения. 2-е изд., испр. и доп. Учебник для бакалавриата и магистратуры: монография / Игорь Николаевич Бекман. – М.: Юрайт, 2016. – 496 с.
3. Голубков Г.В. Ридберговские состояния атомов и молекул и элементарные процессы с их участием. – М.: Мир, 2009. – 229 с.
4. Гомбаш П. Проблема многих частиц в квантовой механике. – М.: ИЛ, 1952. – 279 с.
5. Давыдов А.С. Квантовая механика: учеб. пособие. - 3 изд., стереотипное. - СПб.: БХВ-Петербург, 2011. - 704 с.
6. Дьячков С.А., Левашов П.Р. Исследование области применимости модели Томаса-Ферми по отношению к квантовым и обменным поправкам // Известия Кабардино-Балкарского Государственного Университета. 2014. Т. 4, № 1. С. 17–21.
7. Киришнер Т., Тавара Х., Толтихина И.Ю., Уланцев А.Д., Шевелько В.П., Штулькер Т. Многоэлектронная ионизация атомов быстрыми ионами: приближение нормированных экспонент // Журнал технической физики. – том 76, вып. 9. 2006. – С. 22–30.

8. Ландау Л.Д. Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Физматлит, 2008. - 800 с.
9. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Том 2. - М.: Мир, 1974. - 315 с.
10. Чирков А.Ю. Введение в физику плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006.

References:

1. Baikov Yu.A., Kuznetsov V.N. Quantum mechanics. M.: Binom, 2015. - 291 p.
2. Beckman I.N. Atomic and nuclear physics: radioactivity and ionizing radiation. 2nd ed., rev. and additional Textbook for undergraduate and graduate studies: monograph / Igor Nikolaevich Beckman. - M.: Yurayt, 2016. - 496 p.
3. Golubkov G.V. Rydberg states of atoms and molecules and elementary processes with their participation. - M.: Mir, 2009. - 229 p.
4. Gombash P. The problem of many particles in quantum mechanics. - M.: IL, 1952. - 279 p.
5. Davydov A.S. Quantum mechanics: textbook. allowance. - 3rd ed., stereotypical. - St. Petersburg: BHV-Petersburg, 2011. - 704 p.
6. Dyachkov S.A., Levashov P.R. Investigation of the domain of applicability of the Thomas-Fermi model in relation to quantum and exchange corrections // Bulletin of the Kabardino-Balkarian State University. 2014. T. 4, No. 1, pp. 17-21.
7. T. Kirshner, H. Tavera, I. Yu. - Volume 76, no. 9. 2006 - S. 22-30.
8. Landau L.D. Quantum mechanics / L.D. Landau, E.M. Lifshits. - M.: Fizmatlit, 2008. - 800 p.
9. Flygge Z. Problems in quantum mechanics. Volume 2. - M.: Mir, 1974. - 315 p.
10. Chirkov A.Yu. Introduction to Plasma Physics. M.: Publishing house of MSTU im. N.E. Bauman, 2006.