Мы по-прежнему в самосогласованном поле

и рассмотрим одну очень всра… сложную вариацию метода самосогласованного поля, которая активно применяется в атомной физике.

Идея: Томас-Ферми были фанатами электрода и сказали: а давайте в качестве потенциальной энергии возьмём потенциал из электрода.
Т.е. введём $n_e(r)$- число электронов внутри шара радиусом r.
Тогда электростатический потенциал φ(r) будет определяться из уравнения Пуассона:

$$\Delta\phi = -4\pi\rho_{эл} = -4\pi(+Ze\delta(r) - en_e(r)).$$

Или, записав лапласиан явно через его радиальную часть:

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\phi) = -4\pi[Ze\delta(\vec{r}) - en_e(r)] \quad (1)$$

(Напомним, что φ – потенциал, а не угол! Угол у нас возникнуть нигде не может, у нас сферическая симметрия).

Это было классическое уравнение, связывающее $n_e(r)$ и φ(r). Для системы нужно ещё второе:

$$n_e(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\{2me[\phi(r) - \phi_0]\}^{3/2} \quad (2)$$

Оно получается уже сложнее – с помощью квазиклассики. Идея: использовать соотношение неопределённостей (?!): т.к. электроны находятся на одной орбите радиусом r, они должны быть разнесены по импульсу:

$n_e(r) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\vec{p}$. А импульс определим из $-e\phi(r) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\phi(r)$.

Осталось ещё (3) – ГУ:

$$-\frac{\partial \phi}{\partial r} \simeq e\frac{Ze}{r^2} \Longrightarrow \phi(r) \simeq +\frac{Ze}{r} + const + o(r)$$

$$\phi(r_0) = \frac{Z^* e}{r_0}, \ \frac{d\phi}{dr_0}(r_0) = -\frac{Z^* e}{r_0^2}$$

Где Z^* - заряд атома: $Z - N_e = Z^*$

И получили систему дифуров. Удобно сделать замену:

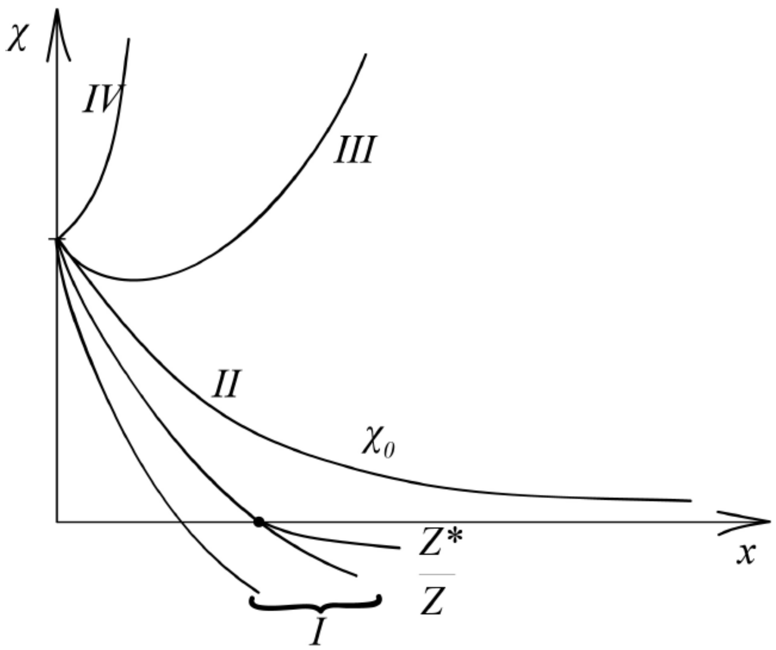
$\phi(r) = \phi_0 + \frac{Ze}{r}\chi(x)$, где $x = \frac{Z^{1/3} r}{\beta a}$, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$, $\beta = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \simeq 0,885$

Получаем т.н. уравнение Томаса-Ферми:

$\sqrt{x}\frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2}$ с ГУ $\chi(0) = 1$ и $\chi(x_0) = 0$, где $x_0 \equiv \frac{Z^{1/3} r_0}{\beta a}$.

В элементарных функциях оно не решается. Есть одно аналитическое решение- $\frac{1}{144x^3}$, но оно не удовлетворяет ГУ – в 0 равно +inf, а не нулю.

Кривые для разных x_0:



Среди всех кривых особенно выделяют одну, соответствующую нейтральному атому. Её асимптотики:

$$\chi^{(0)}(x) \simeq \begin{cases} 1 - 1,59x + o(x^2), \ x << 1 \\ \dfrac{1}{144x^3}, \ x >> 1, \end{cases}$$

Задача:

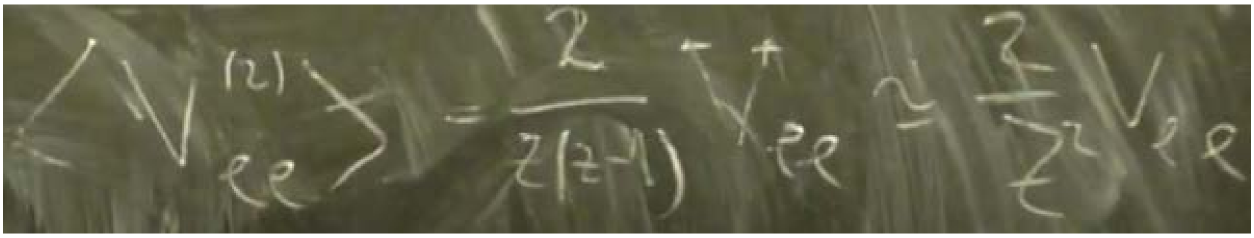
14. В рамках модели Томаса-Ферми вычислить среднюю кинетическую энергию электрона, среднюю энергию взаимодействия пары электронов и энергию полной ионизации атома как функции Z.

(решается тут https://www.youtube.com/watch?v=AQWApWAi1Sk&list=PLcsjsqLLSfNCrxdu2OEhOvpOCyB1wBL8t&index=6 , см. с начала)

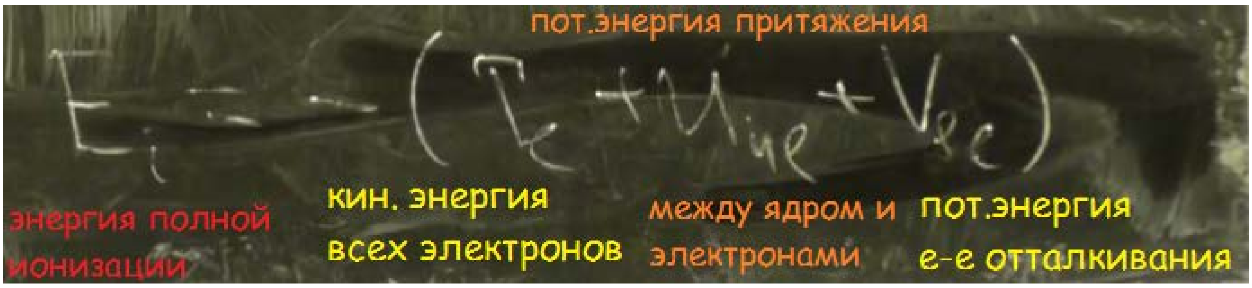
От нас требуют 3 величины.

Сначала заметим, что кин.энергию одного электрона можно выразить через суммарную кин.энергию электронной оболочки:

Аналогично для среднего значения потенциальной энергии отталкивания двух электронов



А энергию ионизации выразим как



:

Далее. Заметим, что мы знаем ВФ в атоме – это функции Томаса-Ферми. Мы можем подсчитать все три величины по формуле среднего значения: $< A > = < \Psi|\hat{A}|\Psi >$ через интеграл. Но функции Томаса-Ферми не элементарны, и интегралы у нас получатся убойными. Но это не повод исчисляться, потому что методом подгона и «нетрудно заметить, что» можно всё найти.

Начнём с U_{ne} – энергии взаимодействия электронов с оболочкой. Это заряд ядра в поле электронов при r->0:

$$U_{ne} = +Ze\cdot\varphi_e(0) =$$

А поле электронов – это суммарное поле минус поле ядра, так что продолжаем цепочку равенств:

$$+Ze\left[\varphi(r) - \frac{Ze}{r}\right]\Big|_{r\to 0}$$

А далее выразим потенциал φ(r) через функцию Томаса-Ферми:

$$Ze\frac{Ze}{r}\left[\chi\left(\frac{Z^{1/3}r}{\beta a}\right) - 1\right]$$

А далее пользуемся асимпотикой Томаса-Ферми:

$$\chi \approx 1 - 1{,}59\frac{Z^{1/3}r}{\beta a} + o(r^2)$$

Т.е. на место на той большой скобки нам просто надо поставить 1,59.
И получаем ответикус:

$$-1{,}59\cdot\frac{Z^{7/3}e^2}{\beta a}$$

(не окончено, U_{ee} и T_e сами гляньте у Парфёнова)