

## I/d-РАЗЛОЖЕНИЕ И ПРИБЛИЖЕНИЕ ТОМАСА – ФЕРМИ

А. Гонсалес\*, Р. Гонсалес\*

*Результаты вычисления основного уровня в секторе  $L = 0$  для системы электронов в идеализированной квадратичной ловушке I/d-методом сравниваются с расчетами в приближении Томаса – Ферми (ТФ) с учетом главных поправок. I/d-формула качественно описывает зависимость энергии от параметра ловушки и числа частиц, а в количественном плане отличается от учитывающих поправки оценок по ТФ не больше, чем на 7% при изменении параметра ловушки на 9 порядков.*

В последнее время ловушки для частиц привлекли внимание экспериментаторов в связи с возможностью использовать их в сверхточных спектроскопических измерениях /1/, для изучения сильно коррелированного кулоновского газа /2/ и т.д.

В работе /3/ I/d-методом /4/ получена формула для энергии основного уровня с  $L = 0$  системы  $N$  электронов в изотропной ловушке (потенциал  $\Omega^2 r^2/2$ ), с помощью которой изучены некоторые свойства этой системы, например, перестройка электронных конфигураций при изменении параметра  $\Omega$ . Формула эта точна в режиме  $\Omega \rightarrow \infty$ , когда межэлектронным отталкиванием можно пренебречь, но предполагается, что она способна описать зависимость энергии от  $\Omega$  до не очень малых значений этого параметра и при не очень больших значениях числа частиц. В области  $\Omega \rightarrow 0$  и  $N \rightarrow \infty$ , т.е. там, где образуется кристалл Вигнера /5, 6/, она, конечно, непригодна ввиду того, что бесконечномерный и трехмерный кристаллы сильно отличаются друг от друга.

В данной работе путем сравнения с результатами приближения Томаса – Ферми (ТФ) с учетом главных поправок показано, что I/d-метод воспроизводит энергию с точностью до нескольких процентов ( $\leq 7\%$ ) при варьировании параметров в диапазоне  $10^7 \geq \Omega \geq 10^{-2}$  (в атомных единицах),  $50 \geq N \geq 19$ . Если учесть, что это та точность, которую можно ожидать из оценок по ТФ, и что I/d-формулы намного проще, то оказывается предпочтительным применение I/d-схемы. Подобные результаты получены для нейтральных ( $Z = N$ ) атомов /7/.

Первые два члена разложения по I/d для энергии основного состояния системы (в секторе  $L = 0$ ) дают /3/:

$$E_d = \Omega d \left[ 1/2 + (N-1)(b + b^{-1} + 2N\lambda_0 b^{-1/2})/4 + (1/d)(K_2(1 + b^{-1}) + \omega_3/2 + (N-1)\omega_4/4 + (K_5 + N(N-3)/4)\omega_5 - N(N-1)/2b) \right],$$

где  $\lambda_0 = \Omega^{-1/2} d^{-3/2}$ ;  $b$  – решение уравнения  $1 = b^2 - N\lambda_0 b^{1/2}$ ;  $\omega_\alpha = (2/b)(1 + 3\kappa_\alpha N\lambda_0 b^{1/2}/4)^{1/2}$ ;  $\kappa_{3,4,5} = 1, 1/2, 1/N$ ;  $K_2 = \sum_i (n_i - 1)$ ;  $K_5 = \sum_i l_i/2$ ;  $n_i$  и  $l_i$  – обычные осцилляторные квантовые числа. Правило для определения  $K_2$  и  $K_5$  следующее: среди совместимых с условием  $L = 0$  конфигураций мы должны выбрать ту, которая минимизирует  $E_d$ . Это правило установлено в пределе  $\Omega \rightarrow \infty$ , но будем использовать его везде. В качестве примеров посмотрим случаи  $N = 19$  и  $N = 50$ . Минимальные конфигурации следующие:

N	Конфигурация	$K_2$	$K_5$	$N\lambda_0$
19	$1s^2 1p^6 1d^{10} 2s$	1	13	$N\lambda_0 < 7,8$
	$1s^2 1p^6 1d^9 1f^2$	0	15	$7,8 < N\lambda_0$
50	$1s^2 1p^6 1d^{10} 2s^2 1f^{14} 2p^6 1g^{10}$	8	57	$N\lambda_0 < 2,29$
	$1s^2 1p^6 1d^{10} 2s^2 1f^{14} 1g^{16}$	2	66	$2,29 < N\lambda_0 < 5,4$
	$1s^2 1p^6 1d^{10} 1f^{14} 1g^{18}$	0	70	$5,4 < N\lambda_0$

\* Институт кибернетики, математики и физики АН Кубы, г. Гавана.

Таблица 1

Сопоставление результатов, полученных в приближениях ТФ и  $I/d$ , при  $N = 19$  и  $N = 50$ .  
 Поправки к  $\epsilon_{TF}$ , обозначенные  $\epsilon_{TF}^*$ , учтены приближенно в пределах  $a \ll 1$  и  $a \gg 1$ .

$a$	$\epsilon_{TF}$	$\epsilon_d (N = 19)$	$\epsilon_{TF}^* (N = 19)$	$\epsilon_d (N = 50)$	$\epsilon_{TF}^* (N = 50)$
$1,44 \cdot 10^{-6}$	$1,751 \cdot 10^{-2}$	$1,803 \cdot 10^{-2}$	$1,790 \cdot 10^{-2}$	$1,800 \cdot 10^{-2}$	$1,771 \cdot 10^{-2}$
$1,495 \cdot 10^{-2}$	0,1805	0,1851	0,1828	0,1841	0,1817
$1,2807 \cdot 10^{-2}$	0,3827	0,3890	0,3808	0,3843	0,3817
$4,7481 \cdot 10^{-2}$	0,6212	0,6248	0,6038	0,6133	0,6131
$1,2702 \cdot 10^{-1}$	0,9145	0,9092	0,8639	0,8882	0,8880
$2,8911 \cdot 10^{-1}$	1,291	1,268	—	1,236	—
$6,0691 \cdot 10^{-1}$	1,800	1,746	—	1,702	—
1,2433	2,538	2,431	—	2,378	—
2,6464	3,738	3,535	—	3,476	—
6,6877	6,226	5,800	—	5,746	—
$4,0490 \cdot 10^1$	18,38	16,63	16,90	16,75	17,66
$1,1788 \cdot 10^2$	36,27	32,23	32,92	32,75	34,67
$2,5398 \cdot 10^2$	59,69	52,32	53,60	53,44	56,82
$4,6337 \cdot 10^2$	88,50	76,74	78,80	78,66	83,92
$7,6038 \cdot 10^2$	122,6	105,4	108,5	108,3	115,9

В табл. 1 представляются численные значения величины  $\epsilon_d = (28/9) (3/2\pi^2)^{1/3} (E_d/N\Omega^4)^{1/3}$  вместе с оценками по ТФ.

Уравнение ТФ для данной системы можно найти традиционным способом [6, 8]. В безразмерных величинах оно имеет вид:  $(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx}) \Phi = \Phi^{3/2} - 1$ , где плотность электронов связана с  $\Phi$  соотношением  $n = (3/4\pi) \Omega^2 \Phi^{3/2}$ . Граничные условия для  $\Phi$  следующие:  $\Phi'(0) = 0$ ,  $\Phi(x_f) = 0$ ,  $\Phi'(x_f) = -x_f/3 + ax_f^{-2}$ . Последнее выражение — закон Гаусса. Параметр  $a$  равен  $(8/3\pi) (2/3)^{1/2} (N/\Omega)$ . Для функционала энергии получаем выражение:  $E_{TF} = (9/28) (3\pi^2/2)^{1/3} N\Omega^{4/3} \epsilon_{TF}(a)$ , где  $\epsilon_{TF}(a) = \Phi(0) + \int_0^{x_f} dx x \Phi^{3/2} (1 + x^3/3a)$ .

Качественное поведение решения в пределах  $a \rightarrow \infty$  и  $a \rightarrow 0$  легко найти, используя аналогию между написанным уравнением ТФ и уравнением движения материальной частицы в потенциале  $\Phi - (2/5)\Phi^{5/2}$ , и при вязкости, обратно пропорциональной времени. При  $a \rightarrow \infty$  имеем  $x_f = (3a)^{1/3}$  и  $\Phi(x < x_f) = 1$ . Функционал  $\epsilon_{TF}$  принимает значение  $(7/10) (3a)^{2/3}$ . С другой стороны, при  $a \rightarrow 0$  имеем  $\Phi \approx \Phi_0 = (x_f^2 - x^2)/6$ , где  $x_f \approx 2^{1/3} 3^{1/4} a^{1/6} / \pi^{1/6}$ ,  $\epsilon_{TF} \approx 7a^{1/3} / 3^{1/2} 2^{5/6} \pi^{1/3}$ . Путем численного решения уравнения ТФ были найдены значения функции  $\epsilon_{TF}(a)$  при выбранных значениях параметра  $a$ . Результаты представлены в табл. 1.

Сравнивая  $\epsilon_d$  с  $\epsilon_{TF}$ , замечаем, что  $\Delta\epsilon = \epsilon_d - \epsilon_{TF}$  обладает следующими свойствами: 1) зависит от  $N$  и  $\Omega$  по отдельности, а не только от их комбинации  $a$ ; 2) меняет знак при  $a \approx 0,01$ ; 3) уменьшается при увеличении  $N$ . Вычислим приближенно поправки к теории ТФ с целью показать, что они обладают теми же самыми свойствами.

В пределе  $a \ll 1$  поправки к  $E_{TF}$  состоят из трех компонентов: градиентных  $E_g$ , обменных  $E_e$  и корреляционных  $E_c$ . Первый из них можно оценить [9], если найти разность выражения для истинной энергии  $E(a \rightarrow 0) = \Omega(3N)^{4/3}/4 + \Omega(3N)^{2/3}/12 + Q(\Omega(3N)^{-2/3})$  и  $E_{TF}(a \rightarrow 0) = \Omega(3N)^{4/3}/4$ , а затем учесть, что  $\Phi$  не очень отличается по функциональной форме от  $\Phi_0$  даже при  $a = 0,1$ . Таким образом, получаем  $E_g = (1/12)\Omega(3N)^{2/3} + \dots$ . Для  $E_e$  и  $E_c$  имеются выражения [6]:  $E_e = -C_e \int d^3r n^{4/3}$ ,  $C_e = 3(3/\pi)^{1/3}/4$ ,  $E_c = \int d^3r n(a + b/n)$ ,  $a$  и  $b$  — константы. Так как в этом пределе  $n \gg 1$ ,  $E_c \ll E_e$ , то можно ограничиться рассмотрением первых двух членов. Для приведенной энергии получаем  $\epsilon_{TF}^* = \epsilon_{TF} + \Delta\epsilon_{TF}$ , где  $\Delta\epsilon_{TF} = 0,2482 \times$

$\times (a/N^2)^{1/3} (1 - 10,90 a^{1/2})$ . Величина  $\Delta \epsilon_{TF}$  проявляет отмеченные выше свойства и, несмотря на приближенный способ вычисления, ее включение улучшает согласие между  $1/d$ -оценками и оценками по ТФ.

Можно поставить вопрос, отражает ли  $E_d$  правильную зависимость  $E$  от  $N$  и  $\Omega$ . Ответ следующий: хотя видно, что  $1/d$ -метод не всегда воспроизводит асимптотику при  $N \rightarrow \infty$ , он обычно дает предсказания в случае среднего числа частиц, для проверки которых нужны более аккуратные, чем по ТФ, расчеты. Например, если разложить  $E_d$  по степеням  $x = N\Omega^{-1/2} d^{-3/2}$ , то получим  $E_d = \Omega(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots)$ , где коэффициенты  $a_n$  зависят лишь от  $N$  и принимают вид:

$$a_0 = Nd/2 + 2(K_2 + K_5),$$

$$a_1 = (N-1)d/2 + 3(N-1)/8 - K_2/2 - K_5(1 - 3/4N),$$

$$a_2 = -(N-1)d/16 - (57N - 3 - 54/N)/512 + K_2/4 + K_5(1 - 3/8N - 9/32N^2)/2.$$

В пределе  $N \rightarrow \infty$  получим  $K_2 \approx N$ ,  $K_5 \approx (3N)^{4/3}/8$ , и тогда  $a_1 \approx -K_5$ ,  $a_2 \approx K_5/2$ , в то время как теория ТФ указывает на то, что должно быть  $a_1 \propto N^{5/6}$ ,  $a_2 \propto N^{1/3}$ . С другой стороны, из выражений для  $a_n$  видно, что  $a_1$  обращается в ноль при  $N \approx 130$ , а  $a_2$  — при  $N \approx 20$ , т.е. в области средних  $N$  поведение  $a_1$  и  $a_2$  далеко от асимптотического.

В противоположном режиме  $a \gg 1$  для корреляционной энергии можно взять вигнеровскую формулу [6]:  $E_c = -\int d^3r 0,056 n^{4/3} / (0,079 + n^{1/3})$ , а главной поправкой к  $E_{TF}$  является сумма  $E_e + E_c$ , которая в пределе  $\Omega \rightarrow 0$  сходится к маделунговской энергии электронного кристалла. В этом пределе для полной энергии имеем выражение  $E_{TF}^*(\Omega \rightarrow 0) = (9/10) N^{5/3} \Omega^{2/3} (1 - (C_e + 0,709) (5/3) (2/9\pi)^{1/3} N^{-2/3})$ , которое мы должны сравнить со следующим:  $E_d(\Omega \rightarrow 0) = (3/4) N^{5/3} \Omega^{2/3} (1 - N^{-1})$ . Видно, что даже первый член не воспроизводится. Это связано с тем, что теперь система классическая, а геометрии бесконечномерной и трехмерной конфигураций электронов сильно отличаются между собой. Однако в области параметров, которую мы рассматриваем, кристаллическая фаза еще не реализуется. В самом деле, известно, что переход в кристалл имеет место при  $r_s \approx 100/10$ , где  $n^{-1} = (4/3) \pi r_s^3$ . Это значит,  $a = 1,3 \cdot 10^4$  при  $N = 19$  и  $a = 3 \cdot 10^4$  при  $N = 50$ , т.е. на порядок выше, чем рассматриваемые нами значения. Можно убедиться, что в данной области  $\epsilon_d$  совпадает с  $\epsilon_{TF}^*$ , вычисляемой по формуле

$$\epsilon_{TF}^* = \epsilon_{TF} - (7/4)(3/4\pi^2)^{1/3} (a/N)^{2/3} \{1 + (0,056/C_e) (0,079 + (2/\pi)(2N/3a)^{2/3})^{-1}\},$$

с точностью до 7%.

Авторы благодарны А.А. Белову, Д.А. Киржницу и Ю.Е. Лозовику за обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Atomic Physics 10, eds. H. Nagumi, S. Shimamura, Elsevier, Amsterdam, 1987.
2. Ichimaru S., Iyetomi H., Tanaka S. Phys. Rep., 149, 91 (1987).
3. Belov A. A., Lozovik Yu. E., Gonzalez A. Phys. Lett. A (в печати).
4. Белов А. А., Лозовик Ю. Е. Препринт ФИАН № 212, М., 1989.  
Белов А. А., Гонсалес А., Лозовик Ю. Е. Препринт ФИАН № 104, М., 1989.
5. Care C. M., March N. H. Adv. Phys., 24, 101 (1975).
6. Lundqvist S., March N. H. eds. Theory of the inhomogeneous electron gas. Plenum, N. Y., 1983.
7. Loeser J. G. J. Chem. Phys., 86, 5635 (1987).
8. Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Т. В. УФН, 117, 3 (1975).
9. Scott J. M. C. Phil. Mag., 43, 859 (1952).
10. Serperley D. M., Alder B. J. Phys. Rev. Lett., 45, 566 (1980).

Поступила в редакцию 22 декабря 1989 г.