

РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ТОМАСА-ФЕРМИ-ДИРАКА

Была проведена большая вычислительная работа *) при помощи электронной счётной машины по решению уравнения Томаса-Ферми-Дирака. Имеется в виду уравнение

$$\frac{d^3\psi}{dx^3} = x \left(\varepsilon + \sqrt{\frac{\psi}{x}} \right)^3,$$

где

$$\varepsilon = \left(\frac{3}{32\pi^2} \right)^{\frac{1}{3}} Z^{-\frac{2}{3}} = 0,211783 Z^{-\frac{2}{3}}, \quad x = \frac{r}{\mu},$$

r — координата вдоль радиуса, $\mu = 0,88534 a_0 Z^{-\frac{1}{3}}$, a_0 — боровский радиус.

При x , близких к нулю, функция ψ может быть представлена рядом

$$\psi = 1 + a_2 x + a_3 x^{\frac{3}{2}} + a_4 x^2 + \dots$$

Коэффициенты a_k подсчитаны до $k=11$.

Счётной машине задавался только коэффициент a_2 (начальный наклон $\psi(x)$). Вычисление производилось через равные интервалы $\Delta w = 0,04$ переменной $w = \sqrt{2x}$. До значения $w = 0,48$ расчёт происходил по формуле разложения в ряд, для больших величин машина производила численное интегрирование.

Решение уравнения было проведено для атомов 24 элементов ($Z=6, 10, 14, 16, 18, 22, 26, 29, 33, 37, 41, 45, 49, 53, 57, 61, 65, 69, 73, 77, 81, 84, 88$ и 92).

Для каждого элемента были испробованы 6—10 различных начальных наклонов. Таким образом, в статье приведено около 200 решений уравнения Томаса-Ферми-Дирака.

Условие нейтрального атома заключается в том, что электрическое поле на границе исчезает. Это соответствует требованию

$$\left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=x_0} = \left(\frac{\psi}{x} \right)_{x=x_0},$$

которое в зависимости от начального наклона выполняется при разных x_0 . Таким образом, полученные решения соответствуют атомам разных размеров.

Если наклон выбран слишком большим, то ψ может обратиться в нуль ранее, чем будет выполнено записанное выше условие. В этом случае решение должно быть «обрезано» при том значении аргумента x , при котором ψ обращается в нуль. Подобные решения представляют нам положительные ионы; заряд ионов может быть вычислен.

Приведённые в работе таблицы построены следующим образом: для каждого a_2 дана через 0,01 единицы таблица значений $\psi(w)$; если решение соответствует нейтральному атому, то дан его размер, если решение соответствует иону, то даны его размер и заряд.

Все промежуточные значения, не фигурирующие в таблице, с достаточной точностью могут быть получены квадратичной интерполяцией.

А. К.

*) N. Metropolis a. J. R. Reitz, J. Chem. Phys. 19, 555 (1951).