1951 г. Февраль *Т. XLIII, вып. 2*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

БИБЛИОГРАФИЯ

P. **Gombás**, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Wien, Springer-Verlag, 1949.

(**П. Гомбаш.** Статистическая теория атома и её приложения. Вена, изд. Шпрингер, 1949.)

Монография директора физического института Университета технических наук в Будапеште проф. П. Гомбаша посвящена изложению статистической трактовки атомных систем на основе работ Томаса-Ферми (1926—1927 гг.). Первая часть (стр. 1—165) посвящена общей теории, во второй части (стр. 167—356) даются приложения в виде подсчётов разнообразных свойств атомов, молекул и кристаллов. Данная книга примыкает к ценной монографии того же автора о приближённых методах квантовой механики, в которой метод Томаса-Ферми рассматривался наряду с обычным методом возмущений, вариационным методом, приближённым методом Вентцеля-Крамерса-Бриллуэна и методом самосогласованного поля *).

Как известно, в квантовой механике, как релятивистской, так и нерелятивистской, точно решается лишь задача водорода, т. е. одного электрона в кулоновом поле ядра; для решения же задачи гелия и тем более других сложных атомов приходится применять приближённые методы. При этом обычный метод возмущений, рассматривающий взаимодействие электронов как малое воздействие, даже в задаче гелия оказался слишком грубым и был с успехом заменён мощным вариационным методом, ведущим начало от Ритца. Для сложных атомов наиболее точные результаты даёт метод самосогласованного поля, в котором волновая функция системы представляется приближённо комбинацией произведений индивидуальных функций отдельных электронов. Однако подсчёты этим способом чрезвычайно громоздки. Дальнейшее упрощение, закономерно вытекающее из предыдущего метода (см. § 16), заключается в том, чтобы вовсе отказаться от волновых функций, а перейти к картине вырожденного газа электронов, заполняющих клетки фазового пространства, соответствующие всем импульсам, вплоть до некоторого максимального, определяемого условием

$$\frac{p_m^2}{2m} = e\varphi.$$

Теперь, с одной стороны, электростатический потенциал задаётся уравнением Лапласа-Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi\varrho,$$

*) См. П. Гомбаш, Теория и методы решения квантовой проблемы многих тел (немецк.). Базель, изд. Биркхаус, 1950.

с другой стороны, плотность ρ непосредственно определяется объёмом фазового пространства, занятого электронами, т. е. через p_m, или опять-таки потенциалом φ. В результате получаем основное дифференциальное уравнение Томаса-Ферми

$$\Delta\varphi = \frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2me\varphi)^{3/2},$$

или в подходящих безразмерных единицах: $\varphi'' = \frac{\varphi^{3/2}}{x^{1/2}}$. Решая это уравнение при соответствующих граничных условиях, находим φ и, следовательно, плотность распределения электронов в атоме ρ, при помощи которой можно определить различные величины. На первый взгляд кажется невероятным, чтобы подобные простые соображения могли дать нечто большее, чем предварительную ориентацию в небольшом круге вопросов. Однако трудами многих авторов, в том числе Дирака, Ферми и самого Гомбаша, была продемонстрирована замечательная мощь теории Томаса-Ферми, которая приводит ко многим результатам не только для атомов, но также и для молекул, кристаллов, притом в прекрасном согласии с опытом и с точностью, во многих случаях не уступающей результатам значительно более кропотливых квантовомеханических расчётов по методу самосогласованного поля.

Конечно, для превращения метода Томаса-Ферми в современное совершенное орудие теории пришлось немало потрудиться как над его обоснованием и обобщением, так и над разработкой приложений.

Перейдем теперь к краткому изложению содержания книги. После изложения основ Ферми-дираковской статистики (§ 1) рассматривается вывод обменной энергии (на единицу объёма):

$$A = -\varkappa_a \rho^{4/3} \quad (\varkappa_a = 0{,}7386\, e^2),$$

возникающей в результате специфического квантового отталкивания электронов с параллельными спинами, а также энергии корреляции (на один электрон): $w_m = -0{,}288\frac{e^2}{r_s}$ (r_s — радиус шара, содержащего один электрон), связанной с учётом специфического взаимодействия электронов антипараллельного спина. Обоснование уравнения Томаса-Ферми в § 3 даётся не только обычным, но также вариационным способом, который весьма удобен для обобщений.

В § 4 анализируются приближённые решения нелинейного уравнения Томаса-Ферми как полученные машинами — интеграторами, так и асимптотические формы, пригодные на больших $\left(\varphi = \frac{144}{x^3}\right)$ и малых ($\varphi = 1 - 1{,}5880464\,x + {}^4/_3\,x^{3/2}\ldots$) расстояниях. Теорема вириала и формула для полной энергии электронов атома (в § 6) завершают изложение основной, сравнительно известной и доступной по другим книгам, части теории. Монографической разработкой дальнейших параграфов мы обязаны автору.

Речь идёт о том, чтобы обобщить теорию Томаса-Ферми, учтя следующие обстоятельства:

1) поправку на обменную энергию (Дирак) § 2, что делает спадание плотности на больших расстояниях более крутым в соответствии с требованиями квантовой теории и вводит конечный радиус атомов; 2) поправку на учёт электростатитического самодействия электронов (Ферми-Амальди), пригодную во внешних областях атомов и приводящую к возможности трактовать также отрицательные ионы (§ 7); 3) одно-

временную модификацию метода Томаса-Ферми при помощи обеих предыдущих поправок (§ 10); 4) поправку на корреляцию, притом с учётом обмена и исключения самодействия (§ 11) (Гомбаш); 5) поправку кинетической энергии путём учёта непостоянства плотности по Вейцзекеру; 6) релятивистское обобщение, приводящее, впрочем, к незначительным поправкам (§ 14); 7) обобщение на крайне высокие температуры (§ 15).

Все эти обобщения уравнения Томаса-Ферми, как правило, вводятся путём добавления к основной энергии электронного газа

$$E = E_k + E_p, \quad E_k = \varkappa_k \int \rho^{5/3}\, d\tau;$$

$$E_p = \frac{1}{2} e^3 \int\int \frac{\rho(r)\,\rho(r')\,d\tau\,d\tau'}{|r - r'|} - e\int V_k \rho\, d\tau,$$

где V_k—внешний потенциал новых членов, соответствующих энергии обмена, энергии корреляции и т. д. и последующей вариации полученного выражения. В результате возникает картина внушительного обобщения первичного уравнения. График плотности, вычисленной со всеми этими поправками, из коих главную роль играют первая и вторая, убедительно иллюстрирует точность общего хода подсчётов плотности, которые, однако, всё же не в состоянии передать характерных изгибов хода квантовой плотности ρ.

В общей части рассматривается также применение теории возмущений к статистической модели (§ 17), нестатическая трактовка электронного газа (§ 20) и некоторые другие вопросы.

Во второй части, посвящённой приложениям, в двух основных главах рассматриваются атомы (§§ 21—29) и кристаллы (§§ 34—35). Здесь же более кратко изложены применения статистической теории к молекулам (§§ 31—33), теория которых только начинает развиваться и представляет трудности ввиду отсутствия сферической симметрии. В заключительных параграфах (§§ 36, 37) разбирается поведение вещества при высоких давлениях и выводится соотношение между давлением и плотностью, применяемое любопытным образом к исследованию внутренних слоёв земли.

Что касается атомов и металлов, то здесь статистическая теория пожинает свои наибольшие успехи. В § 21 излагается вывод образования электронных оболочек, причём, как известно, статистическая теория в поразительном согласии с менделеевской периодической системой указывает на элементы водород ($Z = 1$), бор ($Z = 5$), скандий (Sc, $Z = 21$) и цезий ($Z = 55$ вместо $Z = 58$) как на места, где начинается заполнение соответственно s-, p-, d-, f-, ... оболочек. Заметим, что способность статистической модели описать образование оболочек побудила нас предпринять подобное же исследование для атомных ядер, где, как известно, работы советских и зарубежных авторов последних лет с несомненностью показали наличие периодичностей во многих свойствах (спины, магнитные моменты, квадрупольные моменты и т. д.) *).

Далее излагаются успешные подсчёты энергий ионизации (§ 22), подсчёты термов (рентгеновских и оптических) при помощи комбинированного метода, который использует томас-фермиевский потенциал в уравнении Шредингера (§ 24). Согласие статистических подсчётов Разетти для M-термов ($3d$-состояния) дало превосходное согласие с опытом; например, для урана значение в ридбергах равно 259, тогда как эмпирически имеем 261,2, а теоретический подсчёт без учёта экрани-

*) См. Д. Иваненко и В. Родичев, ДАН **70**, 605 (1950); Д. Иваненко и А. Соколов, ДАН **74**, 33 (1950).

рования дал бы 940. В §§ 28 и 29 рассматриваются вопросы расчёта радиусов атомов и ионов в хорошем согласии с гольдшмидтовскими эмпирическими значениями, а также близкая проблема подсчёта диамагнитной восприимчивости по известной формуле Ланжевена,

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2}\bar{r}^2, \text{ где } \bar{r}^2 = \int \rho r^2 \, d\tau$$

при помощи томас-фермиевской плотности ρ.

В § 29 разбирается важная проблема статистического определения форм-фактора для рассеяния рентгеновских лучей и электронов и, наконец, в § 30 — блоховская теория потери энергии при прохождении заряженных частиц через вещество.

Интересны параграфы, посвящённые ионным кристаллам и металлам, основанные, в частности, на работах автора книги. Проф. Гомбаш, давая теорию этих кристаллов и выводя значение энергий связи коэффициентов сжимаемости и т. д., подчёркивает отсутствие каких-либо новых эмпирических констант.

В целом в этой первой в мировой литературе монографии, посвящённой методу Томаса-Ферми, Гомбаш развёртывает перед читателем увлекательную широкую картину постепенного обобщения метода и разнообразнейших его применений. Подчеркнём, что книга написана весьма ясным стилем, каждый параграф снабжён кратким резюмирующим вступлением; книга снабжена большим числом чертежей и таблиц решений уравнения Томаса-Ферми; литература по данному вопросу приведена в исчерпывающем виде. Должное место отведено известным советским работам по самосогласованному полю (Фока и его сотрудников), по теории металлов (Френкеля и др.). Особый интерес вызывает изложение работ самого Гомбаша и его сотрудников, напечатанных в малодоступных до последнего времени венгерских изданиях.

Поздравляя автора с несомненной удачей, мы считаем необходимым высказать настойчивое пожелание, чтобы труды учёных дружественных стран народной демократии возможно скорее появлялись в русском переводе и со своей стороны служили великой цели дальнейшего культурного сближения наших народов.

Д. Иваненко