

## Thomas-Fermi-aðferðin og efni í segulsviði

I. Fushiki

Board of Studies in Astronomy and Astrophysics,  
University of California at Santa Cruz, U.S.A.

Einar H. Guðmundsson

Raunvísindastofnun Háskólans

C. J. Pethick

NORDITA

Jakob Yngvason

Raunvísindastofnun Háskólans

### Inngangur

Thomas-Fermi-aðferðin er nálgunaraðferð til að reikna orku og raf-eindabéttleika grunnástands fyrir kerfi af rafeindum og kjörnum eins og til dæmis atóm, sameind eða þéttefni (sjá t.d. yfirlitsgrein eftir Lieb 1981). Fyrir efni án segulsviðs gefur aðferðin rétta skammta-fræðilega niðurstöðu í því marktílfelli að rafhleðsla kjarnanna og fjöldi rafeinda stefni á óendanlegt (Lieb *loc.cit.*), og hið sama gildir um efni í segulsviði, ef styrkur sviðsins vex á tiltekinn hátt jafnframt hleðslunni (Jakob Yngvason 1991, Fushiki og fél. 1991 b). Aðferðin er þess vegna fyrst og fremst notuð til að reikna grófgerð rafeindadreifingarinnar í efni með háar kjarnhleðslur. Hér á eftir verður í stuttu máli fjallað um helstu eiginleika aðferðarinnar og sýnt hvernig henni er beitt til að reikna rafeindadreifinguna umhverfis kjarnana. Í því sambandi verður athyglinni beint sérstaklega að efni í segulsviði. Ekki verður farið í smáatriði, en ítarlegri umfjöllun um allt þetta efni er að finna í öðrum greinum eftir Fushiki og félaga (1991 a,b). Verkefni þetta spratt upp-

haflega upp úr tilraun nokkurra stjarnaðlisfræðinga til að gera líkan af yfirborðslögum nifteindastjarna með mjög sterkt segulsvið (Einar H. Guðmundsson 1987, Fushiki og fél. 1989) en ekki verður farið nánar út í þá sálma hér.

### Thomas-Fermi-aðferðin

Nálgunaraðferðin sem kennd er við Thomas og Fermi (Thomas 1927, Fermi 1927) er elsta og einfaldasta dæmið um notkun svonefndra þéttleikafella („density functional formalism“; sjá t.d. Jones og Gunnarsson 1989).

Rafeindadreifingunni í safni rafeinda og kyrrstæðra kjarna er lýst með þéttleikanum  $n = n(\mathbf{r})$  sem er fall af staðnum  $\mathbf{r}$ . Ef í safninu eru  $N$  kjarnar með hleðslu  $Z_i e$  og fasta stöðuvigra  $\mathbf{R}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , er heildarorka safnsins rituð sem felli  $\mathcal{E}[n]$  af gerðinni

$$\mathcal{E}[n] = \mathcal{E}_e[n] + \mathcal{V}_{ee}[n] + \mathcal{V}_{eZ}[n] + U, \quad (1)$$

þar sem

$$U = \sum_{i < j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (2)$$

er rafstöðuorka kjarnanna innbyrðis,

$$\mathcal{V}_{eZ}[n] = -e \int n(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (3)$$

með

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{e Z_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} \quad (4)$$

er sá hluti rafstöðuorku safnsins sem stafar frá víxlverkun rafeinda og kjarna en tilsvarendi stærð fyrir víxlverkun rafeindanna innbyrðis er

$$\mathcal{V}_{ee}[n] = \frac{e^2}{2} \int \int \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}'. \quad (5)$$

Hreyfiorka rafeindanna er í Thomas-Fermi-nálgun rituð

$$\mathcal{E}_e[n] = \int w(n(\mathbf{r})) d^3 \mathbf{r}, \quad (6)$$

þar sem fallið  $w$  er þéttleiki hreyfiorkunnar. Ef tekið er tillit til skiptivíxlverkunar milli rafeinda (Dirac 1930) er  $w$  skilgreint sem summa þéttleika hreyfiorku og skiptiorku, og er þá talað um Thomas-Fermi-Dirac-nálgun. Í því sem hér fer á eftir verður aðeins lauslega minnst á áhrif skiptivíxlverkunar og annarrar leiðréttingar á hreyfiorkuliðnum (6) sem kennd er við von Weizsäcker (1935). Fróðleiksfúsam lesendum er hins vegar bent á greinar Fushiki og félaga (1991 a,b) þar sem fjallað er allrækilega um slíkar leiðréttingar á orkufellinu fyrir efni í segulsviði.

Grunnorka kerfisins skamkvæmt Thomas-Fermi-aðferðinni,  $E^{TF}$ , er jöfn neðra marki (infimum) fellisins  $\mathcal{E}[n]$  með þeim skorðum að  $n \geq 0$  og að heildarhleðsla rafeindanna sé föst. Í einfaldasta tilviki er kerfið óhlaðið og þessi hleðsla því jöfn heildarhleðslu kjarnanna. Ef til er lausn,  $n$ , á þessu hnikunarvandamáli þá er  $n$  lausn á Thomas-Fermi-jöfnunni:

$$w'(n(\mathbf{r})) - e\Phi(\mathbf{r}) - \mu_{\text{tot}} \begin{cases} = 0 & \text{ef } n(\mathbf{r}) > 0 \\ \geq 0 & \text{ef } n(\mathbf{r}) = 0 \end{cases}, \quad (7)$$

þar sem komman merkir deildun með tilliti til  $n$ ,  $\Phi$  er heildarrafastöðumættið og  $\mu_{\text{tot}}$  er heildarefnamætti rafeindanna. Til er ótvíræð lausn á Thomas-Fermi-jöfnunni ef þéttleikafallið  $w$  og afleiða þess, efnamættið  $\mu(n) = w'(n)$ , fullnægja eftirfarandi skilyrðum:

- (i)  $w(0) = 0$ , og  $w$  er samfellt deildanlegt og kúpt fall af  $n$ .
- (ii)  $\mu(n) \geq cn^{1/2+\mathcal{E}}$  fyrir stór  $n$  með  $c > 0$  og  $\mathcal{E} > 0$ .
- (iii)  $\mu(n) \leq \mu(0) + kn^{1/3+\delta}$  fyrir lítil  $n$  með  $k < \infty$  og  $\delta > 0$ .

Nánari athugun leiðir í ljós (Fushiki og fél. 1991 a,b) að í raun nægir að krefjast skilyrðanna i–iii fyrir kúpta hjúpinn af  $w$ ,  $w^* = w^*(n)$ , sem skilgreindur er með

$$w^*(n) = \sup\{l(n) | l(n') = an' + b, l(n') \leq w(n')\}. \quad (8)$$

Lausnin sem fæst með því að nota  $w^*$  í Thomas-Fermi-jöfnunni í stað  $w$  er nákvæmlega hin sama og fæst með því að nota  $w$ . Ein afleiðing af þessu er að  $n$  tekur ekki gildi þar sem  $w \neq w^*$ . Mynd 1 sýndir dæmi um þetta fyrir ákveðið orkufall  $w$ .  $n$  tekur ekki gildi á bilinu  $(n^{(1)}, n^{(2)})$  og heldur ekki fyrir  $n < n^{(0)}$ . Ef þetta orkufall er til dæmis

notað í Thomas-Fermi-reikningum á rafeindadreifingu í atómi, verður útkoman svipuð því sem sýnt er á mynd 2. Þéttleikinn stekkur úr 0 í  $n^{(0)}$  við jaðar atómsins og aftur inni í atóminu milli  $n^{(1)}$  og  $n^{(2)}$ . Við fyrstu sýn virðist ef til vill ósennilegt að orkufall af þessu tagi komi fyrir við raunverulegar aðstæður en staðreyndin er hins vegar sú að þegar skiptiorkuliðir eru teknir með í reikninginn verður orkufallið fyrir rafeindir í segulsviði bylgjað og ekki ósvipað því sem mynd 1 sýnir (Fushiki og fél. 1991 a,b).

Eðlisfræðilega skýringin á stökkum í rafeindabéttleika af því tagi sem sjá má á mynd 2 er tiltölulega einföld. Auðvelt er að sýna fram á að samþjappanleiki rafeindagassins,  $\kappa$ , fæst með jöfnunni

$$\kappa(\mathbf{r})^{-1} = n(\mathbf{r})^2 w''[n(\mathbf{r})], \quad (9)$$

þannig að  $\kappa$  er óendanleg stærð á bilinu  $n^{(1)} < n < n^{(2)}$  þar sem  $w''' = 0$ . Þetta er vísbending um hamskipti enda má einnig sýna fram á að um þrýsting rafeindagassins og efnamættið gildir  $P(n^{(1)}) = P(n^{(2)})$  og  $\mu(n^{(1)}) = \mu(n^{(2)})$ .

Á mynd 2 er gefið til kynna að  $n$  stefnir á  $+\infty$  þegar  $r$  stefnir á 0. Þessi niðurstaða er óhjákvæmileg afleiðing af þeim nálgunum sem aðferð Thomas-Fermis byggir á. Þegar leiðréttingu von Weizsäcker's er beitt í reikningunum fæst hins vegar lausn þar sem  $n$  tekur endanlegt gildi fyrir  $r = 0$ . Jafnframt eyðir leiðréttingarliðurinn hinu óæskilega stökki á jaðri atómsins og gefur þéttleika sem fellur eins og veldisfall fyrir stór gildi á  $r$ . Einnig mýkir hann stórlega öll stökk í þéttleika inni í atómum. Þessar niðurstöður eru í samræmi við almenna eiginleika lausna á Schrödinger-jöfnunni. Af þessu má ljóst vera að nota verður hreina Thomas-Fermi-nálgun með varúð. Ef til vill er einn helsti ókostur aðferðarinnar þó sá að hún spáir því að sameindir séu ekki til. Þessi fullyrðing („the no-binding theorem“) var fyrst sönnuð fyrir efni án segulsviðs (Teller 1962) mörgum árum eftir að nálgunaraðferðin var upphaflega sett fram. Lieb og samstarfsmenn hans (sjá t.d. Lieb 1981) endurbættu sönnun Tellers og gerðu hana almennari. Nýlega sýndu svo Fushiki og félagar (1991 a,b) fram á að niðurstaðan gildir einnig fyrir efni í segulsviði og reyndar fyrir hvaða orkufall  $w$  sem er, ef kúpti hjúpur  $w$  fullnægir skilyrðum i–iii hér að framan.

### Efni í segulsviði

Orkufallinu fyrir efni í segulsviði, þegar eingöngu er tekið tillit til hreyfiorku rafeinda, er lýst með jöfnunum (Fushiki og fél. 1991 b).

$$w = \frac{1}{3}n_*\hbar\omega_B \left[ \zeta^{3/2} + 2 \sum_{\nu=1}^{[\zeta]} (\zeta + 2\nu)(\zeta - \nu)^{1/2} \right] \quad (10a)$$

og

$$n = n_* \left[ \zeta^{1/2} + 2 \sum_{\nu=1}^{[\zeta]} (\zeta - \nu)^{1/2} \right], \quad (10b)$$

þar sem  $\zeta = \mu/(\hbar\omega_B)$  og  $[\zeta]$  er heiltöluhluti  $\zeta$ . Hér er  $\omega_B = eB/(mc)$  hringhraðaltíðnin og  $n_* = (2/\pi^{1/2})(eB/hc)^{3/2}$  gildið sem rafeindaþéttleikinn hefur þegar fyrsta rafeindin sest á næstlægsta Landau-orkustigið. Mynd 3 sýnir  $w$  sem fall af  $n$ . Athugið að  $w''$  er almennt jákvætt en verður 0 í hvert skipti sem nýtt Landau-stig kemur til sögunnar. Þetta sést vel á mynd 5 sem sýnir  $w''$  sem fall af  $n$ . Mynd 4 sýnir hins vegar efnamættið  $\mu = w'$  sem fall af  $n$ .

Til samanburðar er rétt að minna á að fyrir efni án segulsviðs er orkufallið mun einfaldara:

$$w(n, B = 0) = \frac{3(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 n^{5/3}}{10 m_e}. \quad (11)$$

Mynd 6 sýnir niðurstöðu úr Thomas-Fermi reikningum á þéttleika rafeinda sem fall af fjarlægð frá kjarnanum í kúlusamhverfu járnatómi ( $Z = 26$ ). Styrkur segulsviðsins er  $10^8$  T. Niðurstaðan fékkst með því að heilda saman jöfnu Poissons

$$\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = 4\pi e[n(\mathbf{r}) - \sum_i Z_i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)] \quad (12)$$

og Thomas-Fermi-jöfnuna (7) með orkufallinu sem gefið er í (10). Á myndinni er fjarlægðin frá kjarnanum skrifuð sem margfeldi af stærðinni  $r_B = (\hbar c/eB)^{1/2}$ . Greinilega sést hvar ný Landau-stig koma við sögu; hallatala ferilsins  $n(\mathbf{r})$  er ósamfelld í þeim punktum. Hún stefnir á endanlegt neikvætt gildi að neðan en á  $-\infty$  að ofan. Ástæðuna fyrir þessari hegðun má sjá á mynd 5. Þar sést að í hvert skipti sem komið

er að nýju Landau-stigi stekkur  $w''$  úr endanlegu jákvæðu gildi niður í 0 og veldur þess vegna stökki í samþjappanleikanum  $\kappa$  (sjá jöfnu (9)). Sambandi  $w''$  og stigulsins í þéttleikanum er almennt lýst með jöfnunni

$$\nabla n(\mathbf{r}) = e\nabla\Phi(\mathbf{r})/w''(n(\mathbf{r})), \quad (13)$$

sem skýrir lögun ferilsins á myndinni.

Í grein Fushiki og félaga (1991 b) er meðal annars fjallað um áhrif leiðréttinganna sem kenndar eru við Dirac og von Weizsäcker á niðurstöður reikninga á  $n(\mathbf{r})$ . Skiptiorkuleiðréttingin veldur stökkum í  $n$  í punktunum þar sem ný Landau-stig byrja að koma við sögu. Þessi stökk eru hins vegar mjög lítil og leiða má rök að því að þau hverfi að mestu eða öllu leyti þegar stigulsleiðréttingu von Weizsäcker er einnig beitt í reikningunum.

Þegar reikniðferð Thomas-Fermis er notuð vakna eðlilega spurningar um gildissvið aðferðarinnar, það er að segja spurningar um það hvaða skilyrðum þurfi að vera fullnægt til þess nálgunin gefi sémilega góða mynd af grófgerð rafeindadreifingarinnar. Grundvallarskilyrðið er það, að ekki sé verulegur munur á eðlisfræðilegum stærðum eins og þéttleika rafeinda og rafstöðumætti á svæðum sem eru minni en sem svarar Fermi-bylgjulengd rafeinda á svæðinu. Í efni án segulsviðs leiðir þetta í stórum dráttum til þeirrar niðurstöðu, til dæmis í atómreikningum, að nálgunin verður betri eftir því sem rafhleðsla kjarnanna vex. Þessi staðreynd tengist skölunareiginleikum Thomas-Fermi-kenningarinnar, sem lítillega verður fjallað um hér á eftir.

Þegar kerfið er í segulsviði verður svarið við spurningunni heldur flóknara. Það stafar af því að ný stærð, segulsviðsstyrkurinn  $B$ , er komin til sögunnar og jafnframt brýtur stefna segulsviðsins samhverfuna, sem áður var til staðar. Um þetta atriði er nánar fjallað í grein Fushiki og félaga (1991 b).

Að lokum förum við örfáum orðum um skölunareiginleika Thomas-Fermi-aðferðarinnar. Thomas-Fermi-jafnan breytist ekki við eftirfarandi aðgerðir:

$$\begin{aligned}
Z_i &\rightarrow aZ_i, \\
B &\rightarrow a^{4/3}B, \\
\mathbf{R}_i &\rightarrow a^{-1/3}\mathbf{R}_i, \\
\lambda &\rightarrow a^{4/3}\lambda, \\
n(\mathbf{r}) &\rightarrow a^2n(a^{1/3}\mathbf{r}) =: n_a(\mathbf{r}),
\end{aligned} \tag{14}$$

þar sem  $a > 0$  er einhver skölunarpáttur, og um Thomas-Fermi-orkuna gildir

$$E^{TF}(aZ_i, a^{4/3}B, a^{-1/3}\mathbf{R}_i) = a^{7/3}E^{TF}(Z_i, B, \mathbf{R}_i). \tag{15}$$

Af þessu leiðir meðal annars að lögun atóms í Thomas-Fermi nálgun er eingöngu háð hlutfallinu  $B/Z^{4/3}$ , og á línuriti sem sýnir  $n/Z^2$  sem fall af  $Z^{1/3}r$  mundu öll atóm með sama gildi á  $B/Z^{4/3}$  líta eins út (Fushiki og fél. 1991 b).

Fyrir efni án segulsviðs ( $B = 0$ ) var á áttunda áratugnum sannað stærðfræðilega (sjá Lieb 1981) að kenningin er skölunarmarkgildi skammtafræðinnar í eftirfarandi skilningi: Ef  $E^{QM}$  táknar skammtafræðilega grunnorku safnsins og  $n^{QM}$  er tilsvareandi rafeindapéttni grunnástandsins þá gildir

$$\lim_{a \rightarrow \infty} E^{QM}(aZ_i, B = 0, a^{-1/3}\mathbf{R}_i)/a^{7/3} = E^{TF}(Z_i, B = 0, \mathbf{R}_i) \tag{16}$$

og

$$\lim_{a \rightarrow \infty} n^{QM}(a^{-1/3}\mathbf{r}; aZ_i, B = 0, a^{-1/3}\mathbf{R}_i)/a^2 = n^{TF}(\mathbf{r}; Z_i, B_0, \mathbf{R}_i). \tag{17}$$

Í ljósi skölunareiginleika kenningarinnar fyrir efni í segulsviði (sjá (14) og (15)) má því vænta þess að almennar gildi að

$$\lim_{a \rightarrow \infty} E^{QM}(aZ_i, a^{4/3}B, a^{-1/3}\mathbf{R}_i)/a^{7/3} = E^{TF}(Z_i, B, \mathbf{R}_i) \tag{18}$$

og

$$\lim_{a \rightarrow \infty} n^{QM}(a^{-1/3}\mathbf{r}; aZ_i, a^{4/3}B, a^{-1/3}\mathbf{R}_i)/a^2 = n^{TF}(\mathbf{r}; Z_i, B, \mathbf{R}_i). \tag{19}$$

Þessar jöfnur hafa nú nýlega verið sannaðar (Jakob Yngvason 1991).

## Þakkir

Höfundar þakka Örnólfi E. Rögnvaldssyni fyrir aðstoð við að teikna myndir 3–6. Ennfremur er þéttefnisfræðingum við eðlisfræðistofu Raunvísindastofnunar þakkað fyrir afnot af tölvubúnaði.

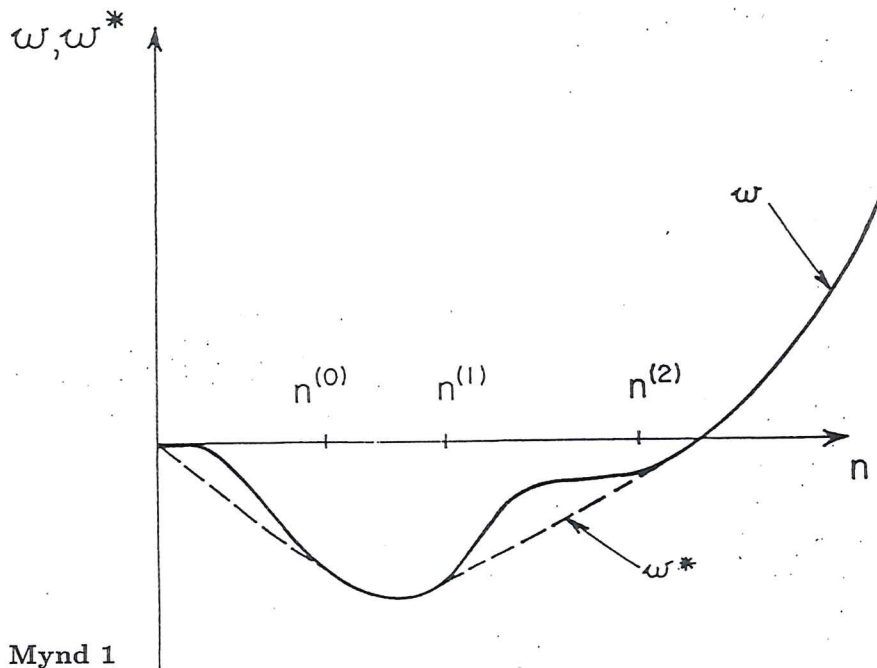
## Heimildir

- Dirac, P. A. M., 1930. Note on the exchange phenomena in the Thomas-Fermi atom. *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **26**, 376–385.
- Einar H. Guðmundsson, 1987. Yfirborð nifteindastjarna. Í *Eðlisfræði á Íslandi III*. Ritstjórar Jón Pétursson og Þór Jakobsson. Reykjavík: Eðlisfræðifélag Íslands.
- Fermi, E., 1927. Un metodo statistico per la determinazione di alcune priorieta dell'atome. *Rend. Accad. Naz. Lincei* **6**, 602–607.
- Fushiki, I., Einar H. Guðmundsson og C. J. Pethick, 1989. Surface structure of neutron stars with high magnetic fields. *Ap. J.*, **342**, 958–975.
- Fushiki, I., Einar H. Guðmundsson, C. J. Pethick og Jakob Yngvason, 1991a. Properties of the electron gas in a magnetic field and their implications for Thomas-Fermi type theories of matter. *Phys. Lett. A.*, **152**, 96–100.
- Fushiki, I., Einar H. Guðmundsson, C. J. Pethick og Jakob Yngvason, 1991b. Matter in a magnetic field in the Thomas-Fermi and related theories. *NORDITA forprent*.
- Jakob Yngvason, 1991. Thomas-Fermi Theory for Matter in a Magnetic Field as a Limit of Quantum Mechanics. *Lett. Math. Phys.* **22** (í prentun).
- Jones, R. O., og O. Gunnarsson, 1989. The density functional formalism, its applications and prospects. *Rev. Mod. Phys.*, **61**, 689–746.
- Lieb, E. H., 1981. Thomas-Fermi and related theories of atoms and molecules. *Rev. Mod. Phys.*, **53**, 603–641.
- Teller, E., 1962. On the stability of molecules in the Thomas-Fermi theory. *Rev. Mod. Phys.*, **34**, 627–631.
- Thomas, L. H., 1927. The calculation of atomic fields. *Proc. Camb. Philos. Soc.*, **23**, 542–548.
- von Weizsäcker, C. F., 1935. Zur Theorie der Kernmassen. *Z. Phys.*, **96**, 431–458.

## Summary

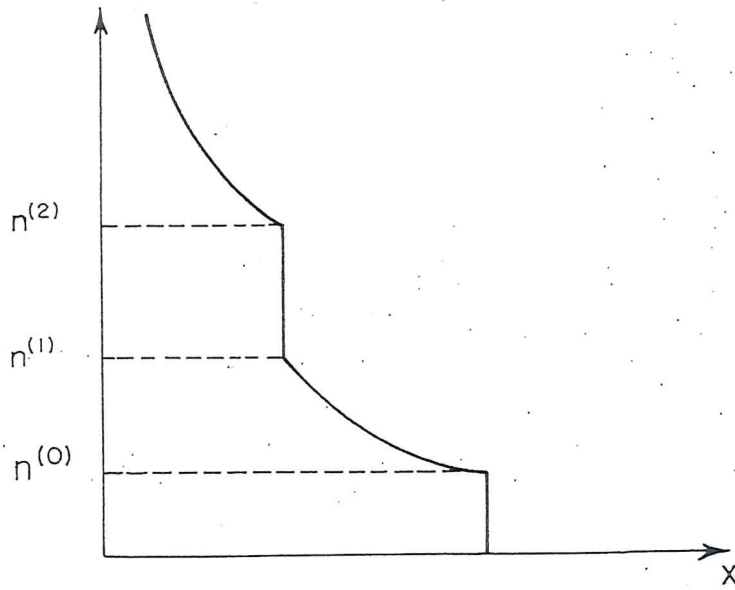
We discuss some of the main properties that are common to all theories of Thomas-Fermi type, such as the conditions for the existence of a unique solution to the Thomas-Fermi equation and how a singularity in the gradient of the electron density,  $n$ , is unavoidable if the energy density, which is a function of  $n$ , deviates from convexity. We investigate the energy density of the homogeneous electron gas in a magnetic field and show results of Thomas-Fermi calculations for atoms in strong fields. Finally we discuss the scaling properties of Thomas-Fermi theory in a magnetic field.





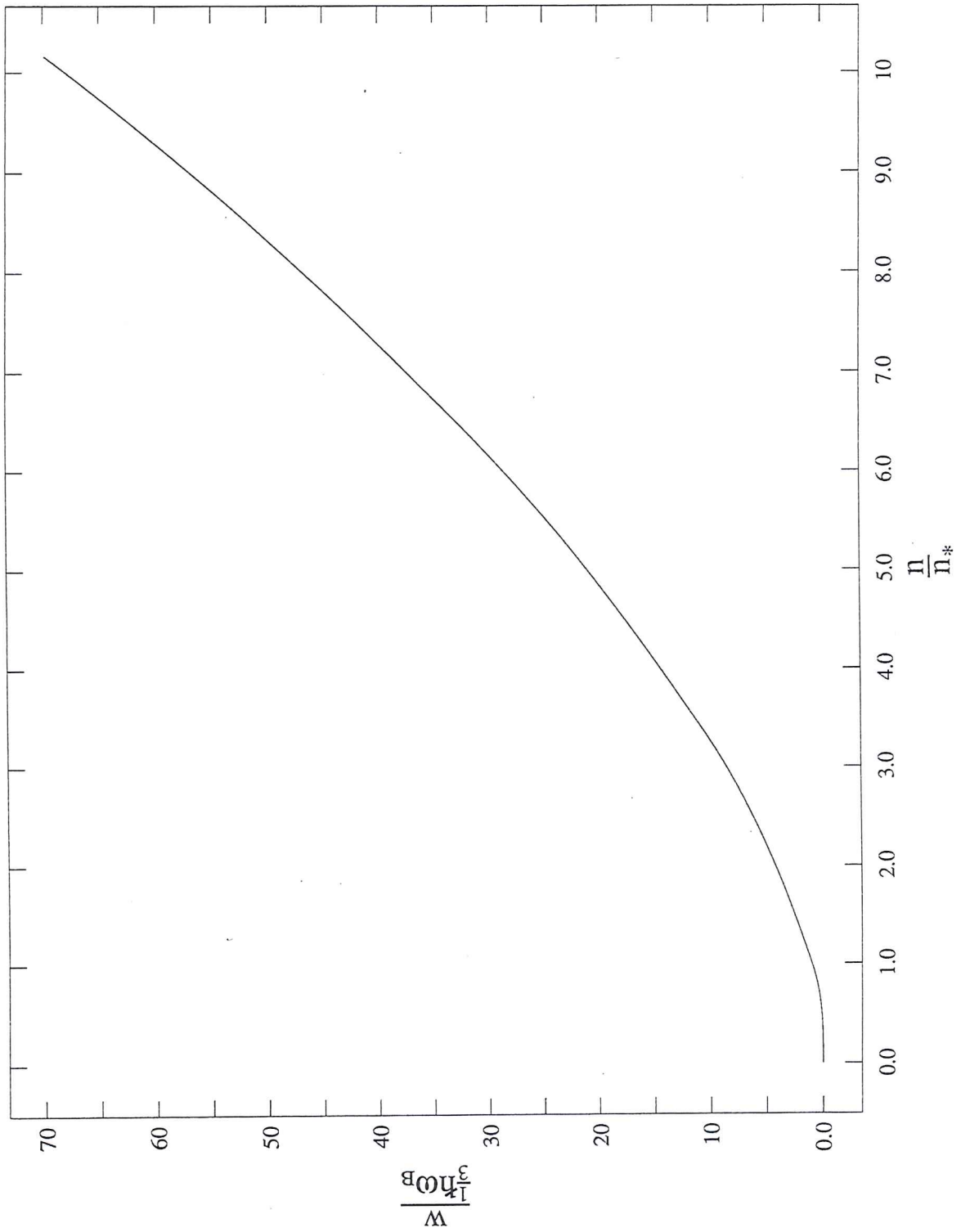
Mynd 1

$n$

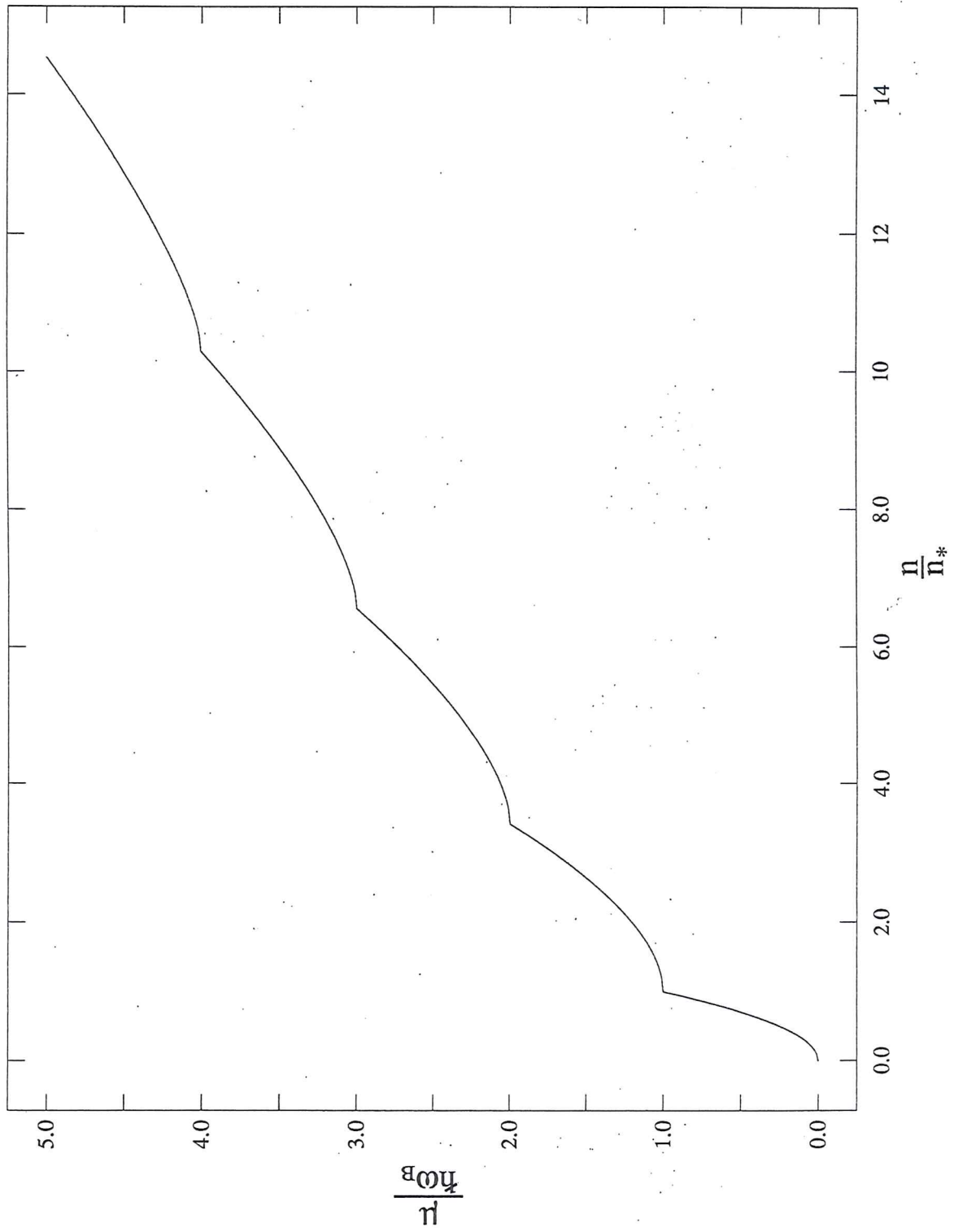


Mynd 2

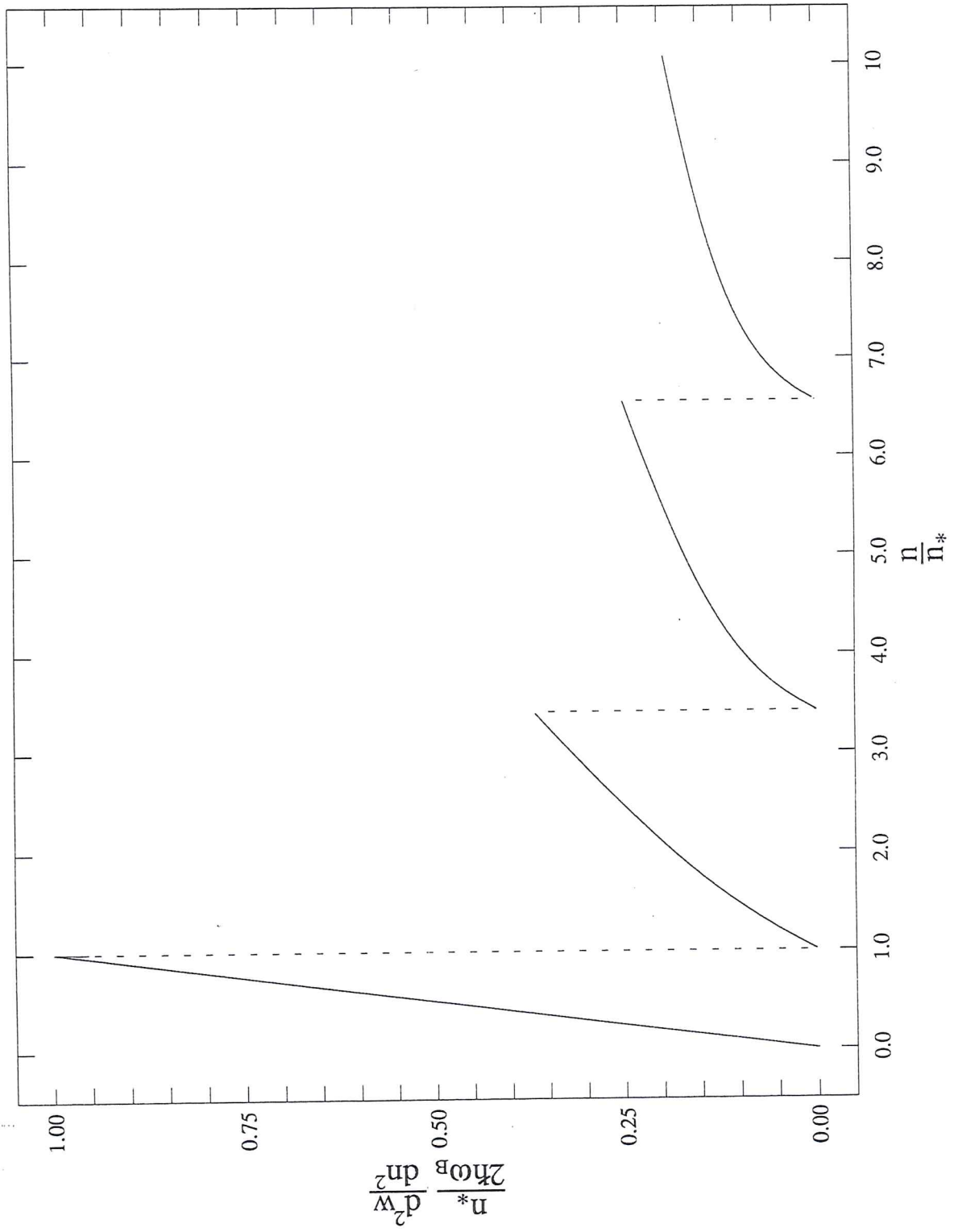
Mynd 3



Mynd 4



Mynd 5



Mynd 6

