ISSN 1512-1461

UDC 539: Physical nature of matter

ВЕТВЯЩИЕСЯ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ II-ГО ПОРЯДКА ФИЗИКИ, ЧАСТЬ-2

Дмитрий Курдгелаидзе
Грузинский Технический Университет, Институт Вычислительной Математики им.Мусхелишвили.
Адрес: ул. Костава 75, почтовое отделение 01

Аннотация
Построена теория электронного газа, заключенного в ограниченный объем. Решена вариационная задача построения уравнения состояния электронного газа, заключенного в непроницаемый объем V. Определена плотность электронного газа в этом случае и вид обобщения уравнения ТФД в различных приближениях. Получены точные ветвящиеся решения обобщенного уравнения ТФД..

Ключевые слова: *электронный газ, уравнения Томаса- Ферми-Дирака.*

Теория электронного газа, заключенного в ограниченный объем, и Ветвящиеся Решения вариационно обобщенного уравнения Томаса- Ферми-Дирака (ТФД)

§1. Квантовомеханический учет взаимодействия электронного газа в металле с кристаллической решеткой

Постановка вопроса.
Как уже было сказано, в случае металла, уравнение Шредингера в общем виде учитывает все виды взаимодействия, имевшие место внутри металла. Однако, в процессе упрощения уравнения, в частности, при получении уравнения самосогласованного поля часть этого взаимодействия теряется. В результате получаем случай, когда плотности электронного газа отдельных атомов в металле не перекрываются, как это имеет место в случае рассмотренной выше первой - действительной - ветви ветвящегося решения. В результате рассматриваемая система представляет собой систему изолированных атомов. Для того, чтобы восстановить утерянную в процессе упрощения исходного уравнения Шредингера часть взаимодействия электронного газа с кристаллической решеткой, учтем, что распределение эквипотенциальных поверхностей полученного выше ветвящегося решения образует гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку. В случае первой ветви (действительного решения), внутри кубического кристалла находится октаэдр с вершинами в центрах граней кристалла, поверхность которого образована поверхностями особых точек действительного решения. При этом, внутри октаэдра находится электронный газ, движущийся по эквипотенциальным поверхностям действительного решения и который, вследствие взаимодействия электронного газа с кристаллической решеткой, оказывается запертым внутри октаэдра. Это значит, что стенки кристалла для электронов являются абсолютно отражающими. Согласно квантовой механики, как известно, подобное ограничение определенным образом отразится на характер поведения электронного газа.
Из литературы мне стало известно, что теорией электронного газа, заключенного в ограниченном объеме, работал Томас в 1927 году и работа эта была опубликованна в Англbйском физическом журнале. Однако в Москве эту работу, несмотря на все мои усилия,

ISSN 1512-1461

обнаружить я не смог. В результате я был вынужден сам разработать эту теорию, которую и излагаю ниже.

1. Ограничение на координаты и импульсы электронного газа, заключенного в ограниченном объеме[1] .

Если электронный газ заключен в объеме $V=L_1L_2L_3$, и стенки кристалла являются абсолютно отражающими, то на координаты и импульсы электронов накладываются ограничения в виде

$$0<x_1< L_1,\quad 0<x_2< L_2,\quad 0<x_3< L_3,$$
$$P_1=n_1(\hbar/2L_1),\ P_2=n_2(\hbar/2L_2),\ P_3=n_3(\hbar/2L_3), \qquad (1.1)$$
$$0<n_1=1,2,3,\quad 0<n_2=1,2,3,\quad 0<n_3=1,2,3,$$

При этом

$$P_0^2\leq P^2= n_1^2(\hbar/2L_1)^2+ n_2^2(\hbar/2L_2)^2+ n_3^2(\hbar/2L_3)^2$$
$$P_0^2=(\hbar/2L_1)^2+(\hbar/2L_2)^2+(\hbar/2L_3)^2 \qquad (1.2)$$

В случае, например, кубической решетки
$L_1= L_2= L_3=L_к$,
находим

$$P_0^2<P^2=(n_1^2+n_2^2+n_3^2)(\hbar/2L)^2$$
$$P_0^2= 3(\hbar/2L)^2,\ P_0 = 3^{1/2}(\hbar/2L) \qquad (1.3)$$
$$P_0 = \hbar/V_0,\quad V_0=(8/3^{3/2})V,\ V= L^3$$

Как видим, на импульс электрона P накладывается ограничение снизу в виде $P \geq P_0$.
Соответственно, кинетическая энергия электрона будет ограничена снизу

$$E^{(1)}_{кин} \geq E_{кин}^0$$
$$E_{кин}^0 =P_0^2/2m= 3(\hbar/2L)^2/2m =(3/8)(\hbar^2/m)L^{-2} \qquad (1.4)$$

Из всего этого можно сделать несколько качественных, но весьма важных заключений:

1.Электронный газ, движущийся в кристалле по эквипотенциальным поверхностям первой - действительной - ветви ветвящегося решения
имеет запрещенную зону для значения кинетической энергии электрона. Запрещены значения кинетической энергии электрона, начиная с нуля до значения $E_{кин}^0$. Соответственно, ширина запрещенной зоны равна
$\Delta E_{кин} =E_{кин}^0 = (3/8)(\hbar^2/m)L^{-2}$. Появление запрещенной зоны обусловлено взаимодействием электронного газа с кристаллической решеткой.

2. Электронный газ, движущийся в кристалле по эквипотенциальным поверхностям второй - комплексной - ветви ветвящегося решения не имеет запрещенной зоны для значения кинетической энергии.

ISSN 1512-1461

3. Положения первого и второго пунктов дают основание считать, что Электронный газ, движущийся в кристалле по эквипотенциальным поверхностям первой - действительной - ветви ветвящегося решения, образует нормальную фазу проводимости в кристалле. Электронный газ, движущийся в кристалле по эквипотенциальным поверхностям второй - комплексной - ветви ветвящегося решения с кинетической энергией $E^{(2)}_{кин} \le E_{кин}^{0} = (9/4)(\hbar^2/8m)L^{-2}$ образует сверхпроводящую фазу проводимости в кристалле.

4. Фазовый переход второго рода в металле в данном аспекте представляется как переход электронов, движущихся по эквипотенциальным поверхностям первой - действительной - ветви ветвящегося решения, реализующих нормальную фазу при энергии $E_{кин}^{0} = (9/4)(\hbar^2/8m)L^{-2}$ на второй - комплексной - ветви ветвящегося решения, реализующего в области $E_{кин}^{(2)} \le E_{кин}^{0}$ сверхпроводящую фазу.

5. Энергетическая щель при фазовом переходе второго рода в металле возникает вследствие взаимодействия электронного газа с кристаллической решеткой. Величина этой энергетической щели в случае кубической кристаллической решетки определяется выражением

($\hbar$=1,054.10^{-27}эрг.сек, k_b=1,38 .10^{-16}эрг.K^0 , m=1,09.10^{-27}гр, L=10^{-8}d см.)

$\Delta E = (3/8)(\hbar^2/m L^2)=(0,3822/d^2)\, 10^{-11}$эрг (1.5)

$T_c=(2,68/ d^2)10^4K^0$, (1.6)

d=	5	10	25	30
T/K^0=	10^3	270	40	30

В случае решетки вида

$L_a< L_b< L_c$, $L_a^{-2}> L_b^{-2}> L_c^{-2}\approx L_a^{-2}$

$\Delta E \approx (3/8)(\hbar^2/m L_a^2)=(0,3822/d_a^2)\, 10^{-11}$эрг

$T_c\approx(2,68/ d_a^2)10^4K^0$,

2. Функция распределения и уравнения состояния электронного Газа, заключенного в ограниченном объеме V.

При наложении ограничения на возможные значения координат электронов электронного газа меняется величина фазового объема системы. Если в отсутствие ограничений на координаты фазовый объем

- Ω_0,то при наличии ограничений имеем

$\Omega =\Omega_0-\Omega_1$, (1.7)

$\Omega_0=(4\pi/3)P^3V$,

$\Omega_1=(4\pi/3)P_0^3V=(4\pi/3)\hbar^3(V/V_0)=(3^{1/2}\pi/2)\hbar^3$,

Функция распределения f определяется, как обычно, из выражения

$dN=fd\Omega$ (1.8)

ISSN 1512-1461

здесь dN - число электронов с импульсом в интервале P, P+dP находящихся в объеме V и $d\Omega$ - число квантовых состояний в этом же интервале. Так как согласно принципу Паули электроны заполняют шаровой слой в импульсом пространстве P, ограниченном с условием $P_0 \le P \le P_{мах}$, , $E_0 \le E \le E_{мах}$,то для функция f получаем

$f=1$ если $E_0 \le E \le E_{мах}$ (1.9)
$f=0$ если $E<E_0$, $E>E_{мах}$

При этом

$$d\Omega=4\pi P^2 dPV \quad (1.10)$$

Тогда для полного числа частиц N имеем

$$N=8\pi(V/\hbar^3)\int_{P_0}^{P_{max}} P^2 dP = (8\pi/3)(V/\hbar^3)[P_{мах}^3-P_0^3]$$
$$n=(N/V)= (8\pi/3\hbar^3)[P_{мах}^3-P_0^3]= (8\pi/3)[(P_{мах}/\hbar)^3-(P_0/\hbar)^3] \quad (1.11)$$
$$(P_0/\hbar)^3=1/V_0 ., V_0=(8/3^{3/2})V,$$

Введем

$$n_L= (8\pi/3V_0) , n_{поль}=(8\pi/3)(P_{мах}/\hbar)^3 \quad (1.12)$$

Тогда

$$n_{поль}=n+ n_L \quad (1.13)$$

Средняя кинетическая энергия $E_к^{сред}$ электрона определяется выражением

$$E_к^{сред}= N^{-1}\int_{P_0}^{P_{max}} Ef\, d\Omega= (4\pi/m\hbar^3)(V/N)\int_{P_0}^{P_{max}} P^4 dP =$$
$$=(4\pi/5m\hbar^3 n)(P_{мах}^5-P_0^5) \quad (1.14)$$

$E_к^{сред}$ можно записать и в виде
$$E_к^{сред}/E_{мах}=(3/5)[1-\hbar^3(1/L_0P_{мах})^5]/[1-\hbar^3(1/L_0P_{мах})^3]$$
$$E_{мах}=(P^2_{мах}/2m) \quad (1.15)$$

Полная кинетическая энергия единицы объема электронного газа - $E_к^{пол.}$ дается выражением

$$E_к^{пол.}=n\, E_к^{сред}=(4\pi/5m\hbar^3)(V/N) (P_{мах}^5-P_0^5)= \chi_0(n_{пол}^{5/3}- n_L^{5/3}) \quad (1.16)$$
$$\chi_0=(4\pi/5m\hbar^2)(3/8\pi)^{5/3}$$

Введем

$$E_к^0=\chi_0\, n^{5/3} \quad (1.17)$$

Тогда

ISSN 1512-1461

$E_к^{пол.} = E_к^0\{[1+(n_L/n)]^{5/3} - (n_L/n)^{5/3}\}$ (1.18)

Средняя кинетическая энергия электронного газа в объеме V будет

$E_l^k = E_к^{поль}V = \chi_0[(n+ n_L)^{5/3} - n_L^{5/3}]V = \chi_0[(N+8\pi/3)^{5/3} - (8\pi/3)^{5/3}V^{-2/3}]$ (1.19)

Для давления электронного газа на стенки куба объемом V получаем

$p=(\partial E_l^k/\partial V)=(2/3)\chi_0[(n+ n_L)^{5/3} - n_L^{5/3}] = (2/3)\, E_к^{поль}$ (1.20)

Уравнение состояния электронного газа, заключенного в непроницаемом ящике объема V, примет вид

$pV=(2/3)\, E_к^{пол.}$

Все результаты при $L\to\infty$ переходят в известные результаты теории свободного электронного газа.

3.Обобщение уравнения Томаса -Ферми
(для случая электронного газа, заключенного в ограниченном объеме)

Если составить вариационное уравнение

$\delta(E_L^k+E_p-eNV^0)=0$ (1.21)

где $E_p=e(V_{внеш} +V_{элк})$, здесь $V_{внеш}$ - потенциал внешнего электрического поля, в которое можно включить и поле, удерживающее электронный газ в ограниченном объеме, $V_{элк}$ - потенциал, созданный электронным газом, V^0- т.н. множитель Лагранжа, E_l^k представим в виде

$E_l^k = \chi_0 \int [(n+ n_L)^{5/3} - n_L^{5/3}]d\upsilon$ (1.22)

где интегрирование идет по объему V. После варьирования E_l^k по
$n_{пол} = (n+ n_L)$ получаем

$(5\chi_0/3)\, n_{пол}^{2/3} - [\xi - e(V_{вне}+V_{елк})]=0$ (1.23)

Здесь ξ - граничная энергия Ферми, $E_p=e(V_{внеш}+V_{элк})$. Кроме того, введем

$\varphi= [\xi- e(V_{внеш}+V_{элк})]= \xi- eV_0$ (1.24)

Тогда находим

$n_{пол}=(3/5\chi_0)^{3/2}\varphi^{3/2}$

$n=(3/5\chi_0)^{3/2}\varphi^{3/2} - n_L, \quad n_L= (8\pi/3V_0)$ (1.25)

ISSN 1512-1461

Уравнение Пуассона теперь примет вид

$$\Delta\varphi=4\pi e^2\, n=4\pi e^2[(3/5\chi_0)^{3/2}\varphi^{3/2}-n_L] \qquad (1.26)$$

4. Обобщение уравнения Томаса -Ферми -Дирака (в случае электронного газа, заключенного в ограниченном объеме)

Для получения обобщения уравнения Томаса -Ферми -Дирака в случае электронного газа, заключенного в ограниченном объеме необходимо в вариационное уравнение (1.21) добавить член, учитывающий обменное взаимодействие электронов - $E_{обм}$. Полная обменная энергия взаимодействия электронного газа, заключенного в объеме V, дается выражением

$$E_{обм}=\int A(p)\, d\upsilon \qquad (1.27)$$

где A(p) с учетом ограничения на фазовый объем имеет вид

$$A(p)=-(4\pi e^2/\hbar^4)\int_{P_0}^{P_{max}}\{[(P^2_{max}-P^2)/P]\mathrm{Ln}[(P_{max}-P)/(P_{max}+P)]+2P_{max}\}P^2dP=$$
$$=-(4\pi e^2/\hbar^4)\{P^4_{max}+(P^2_{max}-P_0^{\ 2})/4]\mathrm{Ln}[(P_{max}-P_0)/(P_{max}+P_0)]-$$
$$-P_{max}\,P_0\,(P^2_{max}+P_0^{\ 2})/4]\} \qquad (1.28)$$

Учитывая, что

$$P_0=(\hbar/L_0),\ P_{max}=\hbar(3/8\pi)^{1/3}\, n_{пол}^{1/3},\chi_a=4\pi(3/8\pi)^{4/3}e^2=(3/\pi)^{1/3}\,(3e^2/4) \quad (1.29)$$

получаем

$$A(p)=-\chi_a\, n_{пол}^{4/3}\{1-(1/2)[(n_L/n_{полн})^{1/3}+(n_L/n_{полн})]+ \qquad (1.30)$$
$$+(1/4)[1-(n_L/n_{полн})]^{2/3}\mathrm{Ln}[1-(n_L/n_{полн})^{1/3}]/[1+(n_L/n_{полн})^{1/3}]\}$$

Варьируя A(p) по $n_{полн}$ находим

$$(\delta A(p)/\delta n_{полн})=-(4/3)\chi_a\, n_{пол}^{1/3}\,\{1-(1/4)[(n_L/n_{полн})^{1/3}+(n_L/n_{полн})]+$$
$$+(1/4)[1-(n_L/n_{полн})^{2/3}]\,\mathrm{Ln}[1-(n_L/n_{полн})^{1/3}]/[1+(n_L/n_{полн})^{1/3}]\} \qquad (1.31)$$

Добавляя полученное уравнение к (1.23) получаем вариационное уравнение

$$(5\chi_0/3)\, n_{пол}^{2/3}-(4/3)\chi_a\, n_{пол}^{1/3}\,\{1-(1/4)[(n_L/n_{полн})^{1/3}+(n_L/n_{полн})]+$$
$$+(1/4)[1-(n_L/n_{полн})^{2/3}]\,\mathrm{Ln}[1-(n_L/n_{полн})^{1/3}]/[1+(n_L/n_{полн})^{1/3}]\}-$$
$$-[\xi-e(V_{вне}+V_{елк})]=0 \quad (1.32)$$

ISSN 1512-1461

Введем обозначение

$У=(n_L/n_{полн})$.

Тогда вариационное уравнение запишется в виде

$$(5\chi_0/3)n_{пол}^{2/3}-(4/3)\chi_a n_{пол}^{1/3}\{1-(1/4)[(У^{1/3}+У)+ +(1-У^{2/3})Ln((1-У^{1/3})/(1+У^{1/3}))]\}-[\xi- e(V_{вне}+V_{елк})]=0 \quad (1.33)$$

Решить уравнение (1.33) относительно $n_{полн}$ в таком общем виде не является реальным. Для получения приближенного решения следует учесть, что $У=(n_L/n_{полн})<<1$ и логарифм в предпоследнем члене разложить в ряд

$$Ln((1-У^{1/3})/(1+У^{1/3}))=-2[У^{1/3}+(1/3) У +(1/5)У^{5/3}+++] \quad (1.34)$$

Тогда уравнение (1.33) примет вид

$$(5\chi_0/3)n_{пол}^{2/3}-(4/3)\chi_a n_{пол}^{1/3} [1-(3/4)У^{1/3}+(1/12) У+(1/15)У^{5/3}+ +]- -[\xi- e(V_{вне}+V_{елк})]=0 \quad (1.35)$$

В первом приближении можно принять

$$[1-(3/4)У^{1/3}+(1/12) У+(1/15)У^{5/3}+]=1 \quad (1.36)$$

и в результате приходим к уравнению

$$(5\chi_0/3)n_{пол}^{2/3}-(4/3)\chi_a n_{пол}^{1/3} -[\xi- e(V_{вне}+V_{елк})]=0 \quad (1.37)$$

решением которого является

$$n=e^{-3/2}\sigma_0[\varphi^{1/2}+e^{1/2}\tau_0]^3-n_L , \quad (1.38)$$

где

$$\varphi= [\xi- e(V_{вне}+V_{елк})+ e\,\tau_0^2] , \quad n_L= (8\pi/3V_0) \quad (1.39)$$

При этом уравнение Пуассона будет иметь вид

$$\Delta\varphi=4\pi e^2 n=4\pi e^{1/2}\{\sigma_0[\varphi^{1/2}+ e^{1/2}\tau_0]^3- n_L e^{+3/2}\} \quad (1.40)$$

Во втором приближении можно принять

$$[1-(3/4)У^{1/3}+(1/12) У+(1/15)У^{5/3}+]=1-(3/4)У^{1/3}+=1-(3/4)(n_L/n_{полн})^{1/3}++$$

и находим соответствующие решения

$$n=e^{-3/2}\sigma_0[\varphi^{1/2}+e^{1/2}\tau_0]^3-n_L, \quad \tau_0=(4\chi_a^2/15e\chi_0)^{1/2} \quad (1.41)$$

где

$$\varphi= [\xi- e(V_{вне}+V_{елк})+e(\tau_0^2-\chi_a\ n_L^{1/3}), \quad (1.42)$$

В следующем приближении в уравнении (1.33) выражение

ISSN 1512-1461

$$F(У)= \{1-(1/4)[(У^{1/3}+У)+ +(1-У^{2/3})Ln((1-У^{1/3})/(1+У^{1/3}))]\} \quad (1.43)$$

будем считать заданным в определенном приближении и обозначим его через $F(У_0)$. В таком случае в уравнении (1.33) изменится только постоянный параметр χ_a на χ_a^0 ,где

$$\chi_a \to \chi_a^0 = F(У_0)\chi_a, \quad (1.44)$$

При этом σ_0 не меняется. τ_0 меняется в виде $\tau_0 \to \tau_0^0 = F(У_0)\tau_0$, однако изменение τ_0 фиксируется через параметр λ_2 и поэтому можно написать

$$\sigma_0 \to \sigma_0 ,\ \tau_0 \to \tau_0$$
$$\chi_a \to \chi_a^0 = F(У_0)\chi_a, \quad \lambda_2 \to \lambda_2^0 = F(У_0) \quad (1.45)$$

При

$$n \ll n_L, \quad У_0=1., \quad F(У_0) \approx 0,5$$
$$n \approx n_L, \quad У_0=0,5, \quad F(У_0) \approx 0,15 \quad (1.46)$$
$$n \gg n_L, \quad У_0 \ll 1., \quad F(У_0) \approx 1$$

Таким образом, если $У_0$ меняется в интервале $0<У_0<1$,то $F(У_0)$ меняется в интервале $0,15 \le F(У_0) \le 1$ и, соответственно, λ_2^0 меняется в интервале
$0,15 \le \lambda_2^0 \le 1, \quad 0,0225 \le \lambda^0{}_2{}^2 \le 1,$

Уравнение Пуассона теперь примет вид

$$\Delta\varphi=4\pi e^2 n=4\pi e^{1/2}\{\sigma_0[\varphi^{1/2}+\lambda_2^0 e^{1/2}\tau_0]^3-n_L e^{3/2}\} \quad (1.47)$$

где

$$n=e^{-3/2}\sigma_0[\varphi^{1/2}+\lambda_2^0 e^{1/2}\tau_0]^3-n_L$$
$$\varphi= [\xi- e(V_{вне}+V_{елк})+ \lambda_2^{02} e\,(\tau_0^2-\chi_a\ n_L^{1/3})],\ \ \tau_0=(4\chi_a^2/15e\chi_0)^{1/2} \quad (1.48)$$

§2. Ветвящейся решение обобщенного уравнения Томаса -Ферми -Дирака

Рассмотрим ветвящееся решение обобщенного уравнения Томаса - Ферми -Дирака

$$\Delta_{xx}\varphi=4\pi e^2 n=4\pi e^{1/2}\{\sigma_0[\varphi^{1/2}+\lambda_2^0 e^{1/2}\tau_0]^3-n_L e^{3/2}\} \quad (2.1)$$

где

$$n=e^{-3/2}\sigma_0[\varphi^{1/2}+\lambda_2^0 e^{1/2}\tau_0]^3-n_L,\ \tau_0=(4\chi_a^2/15e\chi_0)^{1/2},\ \ n_L= (8\pi/3V_0)$$
$$\varphi= [\xi- e(V_{вне}+V_{елк})+ \lambda_2^{02}(e\,\tau_0^2-\chi_a\ n_L^{1/3})], \quad (2.2)$$

или после преобразования

$$\Delta_{\xi\xi}\Phi=(\Phi^{1/2}+1)^3-\lambda_4 \quad (2.3)$$

ISSN 1512-1461

$\varphi=b_2^2\ \Phi=(b_2\psi)^2$
$\xi_n=(4\pi\sigma_0\tau_0\lambda_1\lambda_2)^{1/2}x_n$
$\lambda_4= n_L a_0^3/[0{,}095\ .(0{,}225)^3=3^{1/2}\pi\ a_0^3/[0{,}095\ .(0{,}225)^3 L'_x{}^3$ (2.4)
$\lambda_4=(n_L/\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3),\ \ n_L= (8\pi/3V_0)$

Решение будем искать в виде

$\psi=\alpha(\beta+\theta(\sigma)^2)$ (2.5)
$\sigma=\omega_n\xi_n=\varpi_n x_n,\quad \varpi_n=(4\pi\sigma_0\tau_0\lambda_1\lambda_2)^{1/2}\omega_n$ (2.6)
$\omega^0=0{,}238\ (\lambda_1\lambda_2)^{1/2}/a_0,\quad a_0=0{,}53A^0$

В результате для параметров решения функции $\theta(\sigma)$ получаем систему уравнений

1. $8\omega^2\ A_2=2\alpha/5$
2. $8\omega^2\ A_1=B(\chi)$ (2.7)
3. $8\omega^2\alpha\ A_0=D(\chi)$

при этом имеем
1. $\chi=\alpha\beta$
2. $\lambda_4=(2/5)\chi^3+(3/2)\chi^2+2\chi+1$
3. $B(\chi)=(6/5)\chi+(3/2)$
4. $D(\chi)=(6/5)\chi^2+3\chi+2$ (2.8)

Кроме того, имеем еще два уравнения

5. $L\varpi=4K(k_1^2),\qquad \varpi_n=(4\pi\sigma_0\tau_0\lambda_1\lambda_2)^{1/2}\omega_n$
6. $\lambda_4=(n_L/\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3)$ (2.9)

Из этих уравнений находим

$\lambda_2=(\omega/4K)^2(3\pi^5\lambda_1)^{1/3}(e\sigma_0^{1/3}/\tau_0)$
6. $L_x=(\pi 3^{1/2}/0{,}72\ \lambda_4\lambda_1)^{1/3}(1/\sigma_0^{1/3}\tau_0)(1/\lambda_2)$ (2.10)

(Смотрите мат. приложение 1 к (2.10))
Рассматривая в качестве решений

$\theta(\sigma)=e_2(\sigma)=dn(\sigma)+ik_1 sn(\sigma)$,

соответственно имеем

$A_0= A_2=-1/4\ ,\ A_1=1/2-k_1^2$ (2.11)

и в результате получаем для первой и второй ветви решения

Первая ветвь:

ISSN 1512-1461

$$\alpha_+ = \alpha_0, \quad \alpha_0=[5\ D(\chi)/2]^{1/2},$$
$$\omega_+^{\,2}=-\alpha_0\ /5 \qquad (2.12)$$
$$k_1^{\,2}(+)=1/2+5B(\chi)/16\alpha_0$$

Вторая ветвь

$$\alpha_- = -\alpha_0, \quad \alpha_0=[5\ D(\chi)/2]^{1/2}$$
$$\omega_-^{\,2}= \alpha_0\ /5 \qquad (2.13)$$
$$k_1^{\,2}(-)=1/2-5B(\chi)/16\alpha_0$$

В случае второй ветви следует наложить условие

$$0< k_1^{\,2}(-)=[1/2-B(\chi)/4(2A/5)^{1/2}] <1 \qquad (2.14)$$

В результате для второй ветви - комплексного решения - получаем

$$e_2(\sigma)=dn(\sigma)+ik_1sn(\sigma)$$
$$\alpha_-=- \alpha_0, \quad \alpha_0=[5\ D(\chi)/2]^{1/2}$$
$$\omega_-^{\,2}=\alpha_0\ /5, \qquad (2.15)$$
$$k_1^{\,2}(-)=[1/2-5B(\chi)/8\alpha_0]$$

и, окончательно, находим

$$\psi_2=\alpha_-[\beta_- + (dn(\sigma)+ik_1sn(\sigma))^2]= \alpha_0[(\chi/\alpha_0)- (dn(\sigma)+ik_1sn(\sigma))^2]$$
$$k_1= k_1\,(-), \quad \omega_-^{\,2}=\alpha_0\ /5,$$

В случае первого решения имеем

$$\alpha_{+-}= \alpha_0, \quad \alpha_0=[5\ D(\chi)/2]^{1/2}$$
$$\omega_+^{\,2} = -\alpha_0\ /5, \quad \omega_+=i\omega_- \qquad (2.16)$$
$$k_1^{\,2}(+)=[1/2 +5B(\chi)/16\alpha_0]=1- k_1^{\,2}(-)=k_1'^{\,2}(-)$$

В результате преобразования первого решения в виде

$$e_2(i\omega_-, k_1'^{\,2}(-))=dn(i\omega_-, k_1'^{\,2}(-))+ik_1'sn\,(i\omega_-, k_1'^{\,2}(-))=$$
$$= [dn(\omega_-, k_1^{\,2}(-))-k_1'(-)sn\,(\omega_-, k_1^{\,2}(-)]/cn(\omega_-, k_1^{\,2}(-))=e_2(\sigma+iK'+3K)$$

находим

$$e_2(\omega_+, k_1^{\,2}(+))=e_2(\sigma+iK'+3K, \omega_-, k_1^{\,2}(-)) \qquad (2.17)$$

ISSN 1512-1461

Сдвигая фазу в точке$(\sigma+iK'+2K)^2$ имеем

$e_2(\sigma+iK'+2K, \omega_-, k_1^2(-))^2=-[1+cn(\sigma)]/[1-cn(\sigma)]$ (2.18)

и окончательно получаем

$\psi_1=\alpha_+(\beta_++\theta(\sigma+ iK'+2K)^2)= \alpha_+(\beta_++ e_2(\sigma+ iK'+2K)^2)=$
$=\alpha_+\{\beta_+-[1+cn(\sigma)]/[1-cn(\sigma)]\}=\alpha_0\{(\chi/\alpha_0)-[1+cn(\sigma)]/[1-cn(\sigma)]\}.$, (2.19)
$\omega^2=\omega_-^2 =\alpha_0 /5$, $k_1^2= k_1^2(-)$

Из требования положительности плотности электронного газа

$n=\{e^{-3/2}\sigma_0[\varphi^{1/2}+\lambda_2^0e^{1/2}\tau_0]^3-n_L\}=$
$= \sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3\{[\varphi^{1/2}/\lambda_2^0e^{1/2}\tau_0+ 1]^3-(n_L/\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3)\}=$
$=\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3\{\alpha_+\beta_++1)^3-(n_L/\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3)\}=\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3\{\alpha_+\beta_++1)^3-\lambda_4 \}>0$

находим второе ограничение на интервале изменения параметров решения в виде

$n=\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3 \{\alpha_+\beta_++1)^3-\lambda_4 \}>0$ (2.20)

Таким образом, при условии (2.14) и (2.20) система уравнений разрешима, и все параметры ветвящегося решения определяются из приведенной системы уравнений. Для этого, однако, необходимо при значениях $0< \chi$ составить таблицу значений параметров системы как решений рассматриваемой алгебраической системы уравнений.
Формулируем полную систему уравнений, подлежащих решению
при $0< \chi$

1.$(2/5)\chi^3+(3/2)\chi^2+2\chi +1=\lambda_4>0$,
2. $(6/5)\chi+(3/2) = B(\chi)$
3. $6/5)\chi^2+ 3\chi +2= D(\chi)$
4..$\alpha_0=[5 D(\chi)/2]^{1/2}$
5. $\omega_-^2=\alpha_0 /5$, (2.21)
6. $\alpha_-=- \alpha_0$,
7. $\beta=\chi/\alpha_-=-\chi/\alpha_0$
8 . $k_1^2(-)=[1/2-5B(\chi)/8\alpha_0]$
9.. $\lambda_2=(\omega/4K)^2(q_1/\lambda_1^{1/3})$
10. $L_x =(4K/\omega)^2(q_2/q_1)$

$q_1=(3\pi^5\lambda_1)^{1/3}[(0.095)^{1/3}/0,225]=2,02970*(3\pi^5\lambda_1)^{1/3} =19,6819*\lambda_1^{1/3}$
$q_2= (\pi 3^{1/2}/0,72\lambda_4)^{1/3}[0,225(0.095)^{1/3}]^{-1}a_0 =19,1129*\lambda_4^{-1/3}\, a_0$
(Смотрите математическое приложение 2 к (2.21))
При этом для φ и n имеем

ISSN 1512-1461

$\varphi=b_2^2\psi^2$
$n=\{e^{-3/2}\sigma_0[\varphi^{1/2}+\lambda_2^0 e^{1/2}\tau_0]^3-n_L\}$
$n_L=(\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3)\ \lambda_4$

При заданном значении χ из этих уравнений определятся численные значения всех параметров $\omega^2,k_1^2,\alpha,\beta,\lambda_4$ и при $\lambda_1=1$, а также L_x и λ_2.

1. $\lambda_4=(2/5)\chi^3+(3/2)\chi^2+2\chi+1$
2. $N_0=(1+\chi)^3-\lambda_4>0$
3. $B(\chi)=(6/5)\chi+(3/2)$
4. $D(\chi)=(6/5)\chi^2+3\chi+2$
5. $\alpha_0=[5\ D(\chi)/2]^{1/2}$

$q_1=19.710$, $q_2/q_1=0.909*\lambda_4^{-1/3}\ a_0$, $a_0=0{,}53A^0$

q_2	K_1	χ	λ_4	$B(\chi)$	$D(\chi)$	α_0	ω_-^2	β	$k_1^2(-)$	λ_2	L_x/a_0
17.91	1.60	0.10	1.22	1.62	2.31	2.40	0.48	-0.04	0.08	0.23	77.72
16.84	1.60	0.20	1.46	1.74	2.65	2.57	0.51	-0.08	0.08	0.25	72.56
15.87	1.60	0.30	1.75	1.86	3.01	2.74	0.55	-0.11	0.08	0.26	68.03
15.01	1.60	0.40	2.07	1.98	3.39	2.91	0.58	-0.14	0.08	0.28	64.03
14.23	1.60	0.50	2.43	2.10	3.80	3.08	0.62	-0.16	0.07	0.30	60.47
13.52	1.60	0.60	2.83	2.22	4.23	3.25	0.65	-0.18	0.07	0.31	57.28
12.88	1.60	0.70	3.27	2.34	4.69	3.42	0.68	-0.20	0.07	0.33	54.40
12.29	1.60	0.80	3.76	2.46	5.17	3.59	0.72	-0.22	0.07	0.35	51.80
11.75	1.60	0.90	4.31	2.58	5.67	3.77	0.75	-0.24	0.07	0.36	49.43
11.25	1.60	1.00	4.90	2.70	6.20	3.94	0.79	-0.25	0.07	0.38	47.27
10.80	1.60	1.10	5.55	2.82	6.75	4.11	0.82	-0.27	0.07	0.40	45.29
10.38	1.60	1.20	6.25	2.94	7.33	4.28	0.86	-0.28	0.07	0.41	43.46
9.99	1.60	1.30	7.01	3.06	7.93	4.45	0.89	-0.29	0.07	0.43	41.78
9.62	1.60	1.40	7.84	3.18	8.55	4.62	0.92	-0.30	0.07	0.45	40.22
9.28	1.60	1.50	8.73	3.30	9.20	4.80	0.96	-0.31	0.07	0.46	38.78
8.97	1.60	1.60	9.68	3.42	9.87	4.97	0.99	-0.32	0.07	0.48	37.43
8.67	1.60	1.70	10.70	3.54	10.57	5.14	1.03	-0.33	0.07	0.50	36.17
8.40	1.60	1.80	11.79	3.66	11.29	5.31	1.06	-0.34	0.07	0.51	35.00
8.14	1.60	1.90	12.96	3.78	12.03	5.48	1.10	-0.35	0.07	0.53	33.89
7.89	1.60	2.00	14.20	3.90	12.80	5.66	1.13	-0.35	0.07	0.55	32.86
7.66	1.60	2.10	15.52	4.02	13.59	5.83	1.17	-0.36	0.07	0.56	31.89
7.45	1.60	2.20	16.92	4.14	14.41	6.00	1.20	-0.37	0.07	0.58	30.97
7.24	1.60	2.30	18.40	4.26	15.25	6.17	1.23	-0.37	0.07	0.60	30.10
7.05	1.60	2.40	19.97	4.38	16.11	6.35	1.27	-0.38	0.07	0.61	29.28
6.86	1.60	2.50	21.63	4.50	17.00	6.52	1.30	-0.38	0.07	0.63	28.50
6.69	1.60	2.60	23.37	4.62	17.91	6.69	1.34	-0.39	0.07	0.65	27.77
6.52	1.60	2.70	25.21	4.74	18.85	6.86	1.37	-0.39	0.07	0.66	27.07

ISSN 1512-1461

6.36	1.60	2.80	27.14	4.86	19.81	7.04	1.41	-0.40	0.07	0.68	26.40
6.21	1.60	2.90	29.17	4.98	20.79	7.21	1.44	-0.40	0.07	0.70	25.77
6.07	1.60	3.00	31.30	5.10	21.80	7.38	1.48	-0.41	0.07	0.71	25.17
5.93	1.60	3.10	33.53	5.22	22.83	7.56	1.51	-0.41	0.07	0.73	24.59
5.80	1.60	3.20	35.87	5.34	23.89	7.73	1.55	-0.41	0.07	0.75	24.04
5.67	1.60	3.30	38.31	5.46	24.97	7.90	1.58	-0.42	0.07	0.76	23.51
5.55	1.60	3.40	40.86	5.58	26.07	8.07	1.61	-0.42	0.07	0.78	23.01
5.43	1.60	3.50	43.53	5.70	27.20	8.25	1.65	-0.42	0.07	0.80	22.53
5.32	1.60	3.60	46.30	5.82	28.35	8.42	1.68	-0.43	0.07	0.81	22.06
5.22	1.60	3.70	49.20	5.94	29.53	8.59	1.72	-0.43	0.07	0.83	21.62
5.11	1.60	3.80	52.21	6.06	30.73	8.76	1.75	-0.43	0.07	0.85	21.19
5.02	1.60	3.90	55.34	6.18	31.95	8.94	1.79	-0.44	0.07	0.86	20.78
4.92	1.60	4.00	58.60	6.30	33.20	9.11	1.82	-0.44	0.07	0.88	20.39
4.83	1.60	4.10	61.98	6.42	34.47	9.28	1.86	-0.44	0.07	0.90	20.01
4.74	1.60	4.20	65.50	6.54	35.77	9.46	1.89	-0.44	0.07	0.91	19.64
4.66	1.60	4.30	69.14	6.66	37.09	9.63	1.93	-0.45	0.07	0.93	19.29
4.58	1.60	4.40	72.91	6.78	38.43	9.80	1.96	-0.45	0.07	0.95	18.95
4.50	1.60	4.50	76.83	6.90	39.80	9.97	1.99	-0.45	0.07	0.96	18.62
4.42	1.60	4.60	80.87	7.02	41.19	10.15	2.03	-0.45	0.07	0.98	18.30
4.35	1.60	4.70	85.06	7.14	42.61	10.32	2.06	-0.46	0.07	1.00	18.00

Так например, при χ=4.7, имеем

α_0=10.32, β=0.45, ω^2=2.06, k_1^2=0.068,
λ_2=0.99, λ_4=85.06, L_x=17.99a_0=9,53A^0

$\psi_1=10.32\{0.45-[1+cn(\sigma)]/[1-cn(\sigma)]\}$
$\psi_2=10.32\{0.45-[dn(\sigma)+ik_1 sn(\sigma)]^2\}$
k_1^2=0.068 , ω^2=2.06, L_x= 9,53A^0

При χ=0.60 имеем

α_0=3.23, β=0.18, ω^2=0.65, k_1^2=0.073,
λ_2=0.31, λ_4=2.82, L_x=57.27a_0=30.35A^0

$\psi_1=3.23\{0.18-[1+cn(\sigma)]/[1-cn(\sigma)]\}$
$\psi_2=3.23\{0.18-[dn(\sigma)+ik_1 sn(\sigma)]^2\}$
k_1^2=0.073 , ω^2=0.65, L_x= 30.35A^0

$E_1(2К)- E_2(2К)= \varphi_1 (2К)- \varphi_2 (2К)=$
$= 2,90\lambda_2^2 e\ \tau_0^2\alpha^2=2,90\lambda_2^2(0,225*0,82)^2(e^2/a_0)=,$
$=(e^2/a_0)2,90\lambda_2^2(0,225*0,82)^2=2,90\lambda_2^2(0,185)^2(e^2/a_0)=$
$=2,90\lambda_2^2\ 0,034(e^2/a_0)=0,11\lambda_2^2(e^2/a_0)=0,54\lambda_2^2$эв$=1,14*0,54\lambda_2^2*10^4К^0$

$E_1(2К)- E_2(2К)=0,61*\lambda_2^2*10^4К^0$

$0,0225\le\lambda_2^2\le1$, (e^2/a_0)=27,1эв, $a_0=0,53*10^{-8}$см

$137\ К^0\le E_1(2К)- E_2(2К) \le 6000К^0$

мат. приложение к (2.10)

ISSN 1512-1461

5. $L\varpi = 4K(k_1^2)$, $L=3^{1/2} L_x$, $\varpi = (4\pi e\sigma_0\tau_0\lambda_1\lambda_2)^{1/2}\ \omega$
$L_x=(4K/\omega)(12\pi e\sigma_0\tau_0\lambda_1\lambda_2)^{-1/2}$,
$L_x\lambda_2^{1/2}=(4K/\omega)(12\pi e\sigma_0\tau_0\lambda_1)^{-1/2}$
6. $\lambda_4=(n_L/\sigma_0\tau_0^3\lambda_1\lambda_2^3)=(\pi 3^{1/2}/0{,}72\ \lambda_1\lambda_2^3\ \sigma_0\tau_0^3\ L_x^3)$
$L_x\lambda_2=(\pi 3^{1/2}/0{,}72\ \lambda_4\lambda_1\sigma_0\tau_0^3)^{1/3}$
5.$\lambda_2=(\omega/4K)^2(3\pi^5\lambda_1)^{1/3}(e\sigma_0^{1/3}/\tau_0)$
6. $L_x=(\pi 3^{1/2}/0{,}72\lambda_4\ \lambda_1)^{1/3}(1/\sigma_0^{1/3}\tau_0\lambda_2)$

Мат. приложение 2 к (2.21)

8. $\lambda_2=(\omega/4K)^2(3\pi^5\lambda_1)^{1/3}(e\sigma_0^{1/3}/\tau_0)=(\omega/4K)^2\ q_1$
$L_x=(\pi 3^{1/2}/0{,}72\ \lambda_4\lambda_1)^{1/3}(1/\sigma_0^{1/3}\tau_0)(1/\lambda_2)=(q_2/\lambda_2\lambda_1^{1/3})=(4K/\omega)^2(q_2/q_1)$
$q_1=(3\pi^5\lambda_1)^{1/3}(e\sigma_0^{1/3}/\tau_0)=(3\pi^5\lambda_1)^{1/3}[(0.095)^{1/3}/0{,}225]$
$q_2=(\pi 3^{1/2}/0{,}72\lambda_4\ \lambda_1)^{1/3}(1/\sigma_0^{1/3}\tau_0)=(\pi 3^{1/2}/0{,}72\lambda_1\lambda_4)^{1/3}[0{,}225(0.095)^{1/3}]^{-1}\ a_0$
$\sigma_0=0.095(e\ a_0)^{3/2}$, $\tau_0=0{,}225(e/a_0)^{1/2}$
$(e\sigma_0^{1/3}/\tau_0)=[(0.095)^{1/3}/0{,}225]$
$(\sigma_0^{1/3}\ \tau_0)=[(0.095)^{1/3}\ 0{,}225]\ a_0^{-1}$
$a_0 = 0.53A^0$

Литература
[**1].** П. Гомбош, //Статистическая теория атома и ее применение// Москва,1951г.

Article received: 2014-07-26