

Отношение электростатической энергии к средней энергии ферми-газа:

$$\frac{\varepsilon_{el}}{\bar{E}} = -\frac{e^2 Z^{2/3}}{\hbar c} \left(\frac{4\pi}{3 \cdot 3\pi^2} \right)^{1/3} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{9}{10} = -0,62 \frac{e^2}{\hbar c} Z^{2/3} = -4,56 \cdot 10^{-3} Z^{2/3}. \quad (6.3.7)$$

Эта поправка для ультрарелятивистского газа является главной. В силу одинаковой зависимости от n в равном отношении находятся и поправка к давлению и само давление идеального газа. Есть еще второстепенные поправки, связанные с тем, что взаимодействующие электроны распределены неравномерно; при этом в ультрарелятивистском случае наряду с электростатическим взаимодействием надо учитывать и магнитное взаимодействие электронов. Наличие ядер несколько нарушает распределение плотности электронов в пространстве. Заимствуем у Сальпетера (1961) окончательное выражение давления с учетом и других поправок в ультрарелятивистском случае:

$$\frac{P}{P_0} = 1,00116 - 4,56 \cdot 10^{-3} Z^{2/3} - 1,78 \cdot 10^{-5} Z^{4/3}. \quad (6.3.8)$$

Здесь P_0 — давление, вычисленное без учета поправок. Это выражение дает соответственно при $Z = 1, 6, 12, 26$:

$$\frac{P}{P_0} = 0,9976; 0,9859; 0,9768; 0,9598.$$

§ 4. Область средних плотностей

Выше было выяснено, что основная поправка к уравнению состояния связана с электростатическим взаимодействием ядер и электронов и снижает давление по сравнению с давлением свободного невзаимодействующего вырожденного газа.

При этом было получено выражение энергии (на один электрон):

$$\varepsilon_{el} = -\frac{9}{10} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} Z^{2/3} e^2 n^{1/3}. \quad (6.4.1)$$

В нерелятивистской области средняя энергия свободного электрона

$$\overline{E - E_0} = \frac{3}{5} m_e c^2 \frac{x^2}{2} = \frac{3}{10} m_e c^2 \left(\frac{3\pi^2 \hbar^3 n}{m_e^3 c^3} \right)^{2/3}. \quad (6.4.2)$$

Найдем плотность, при которой в этом приближении давление равно нулю. В таком случае должно выполняться равенство

$$\overline{E - E_0} = -\frac{1}{2} \varepsilon_{el}. \quad (6.4.3)$$

Это соотношение получается из условия

$$\frac{\partial (\overline{E - E_0} + \epsilon_{el})}{\partial n} = 0 \quad (6.4.4)$$

и выражает теорему вириала. Использованное приближение дает «нормальную плотность» ρ_0 , т. е. плотность, которую вещество имеет при $P = 0$, соответствующую

$$n_0^{1/3} = \frac{2^{1/3}}{\pi} Z^{2/3} \frac{e^2 m_e}{\hbar^2} = \frac{2^{1/3}}{\pi} Z^{2/3} \frac{1}{a_0}, \quad (6.4.5)$$

где $a_0 = \left(\frac{e^2 m_e}{\hbar^2}\right)^{-1} = 0,5 \cdot 10^{-8}$ см — это «боровский» радиус, радиус первой орбиты атома водорода в старой квантовой механике Нильса Бора.

Соответствующая плотность (A — атомный вес) равна

$$\rho_0 = \frac{A}{Z} \frac{n}{6 \cdot 10^{23}} = \frac{2}{\pi^3} \frac{AZ}{6 \cdot 10^{23} a_0^3} \cong AZ, \quad (6.4.6)$$

т. е. около 1 для водорода, 300 для магния, 1300 для железа, 16 000 для свинца. Согласие с опытом очень плохое. Причина заключается в том, что расчет был проведен по невозмущенному равномерному распределению электронов. На самом же деле взаимодействие с ядром весьма сильно меняет распределение электронов в пространстве даже при плотностях, намного выше приведенных. Поэтому формула (6.2.15) дает только первые два члена разложения точной зависимости давления от плотности. Разложение проводится по падающим степеням плотности: $\rho^{1/3}$ — первый член, $\rho^{2/3}$ — второй, мы и взяли то ρ , при котором эти первые два члена равны. Но когда становится существенным второй член, необходим третий, четвертый и т. д., так что необходим иной подход. В 30-х годах была развита приближенная теория, в которой электронный газ с давлением $P = an^{5/3}$ рассматривался в электрическом поле ядра и самих электронов. Эта теория получила название теории самосогласованного поля.

Рассматривается распределение электронов внутри элементарной ячейки, которую заменяют шаром радиуса r_1 того же объема (см. § 3). Плотность электронов $n(r)$ зависит от радиуса r . Кроме того, рассматривается электростатический потенциал $\phi(r)$.

Запишем, во-первых, уравнение Пуассона, дающее зависимость ϕ от $n(r)$:

$$\Delta \phi = -4\pi \xi(r) = -4\pi [Ze \delta(r) - en(r)], \quad (6.4.7)$$

где $e = 4,77 \cdot 10^{-10}$ — положительное число, заряд электрона (по модулю), $\xi(r)$ есть плотность заряда. Величина $Ze \delta(r)$, где

δ , дельта-функция Дирака, описывает точечный заряд ядра в центре ячейки; $-en(r)$ — заряд электронов, размазанных по ячейке.

Второе уравнение можно записать как условие механического равновесия занятого электронами-элемента объема, на который действуют электростатические силы и силы давления:

$$\xi(r) \mathbf{E} - \nabla P(n) = (-ne)(-\nabla\varphi) - \frac{\partial P(n)}{\partial r} = 0. \quad (6.4.8)$$

Когда объемная сила является потенциальной и давление зависит только от плотности (в данном случае эти условия выполнены), уравнение равновесия можно проинтегрировать, поэтому

$$\frac{e d\varphi}{dr} - \frac{d}{dr} \int \frac{1}{n} dP = 0, \quad H(n) - e\varphi = K, \quad (6.4.9)$$

где K — константа, H — удельная (на один электрон) энтальпия электронного газа, $H = \int \frac{1}{n} dP = E + \frac{1}{n} P$ (энергию E не следует путать с электрическим полем \mathbf{E}).

Примечательно, что $H(n) = E_F(n)$. В самом деле, для нерелятивистского газа

$$\bar{E} - E_0 = \frac{3}{5}(E_F - E_0), \quad P = n \frac{2}{3}(\bar{E} - E_0) = n \frac{2}{5}(E_F - E_0),$$

откуда легко получится с точностью до несущественного слагаемого указанное соотношение между H и E_F . Это соотношение является общим, оно справедливо и в релятивистской области. Окончательно получается уравнение

$$E_F - e\varphi = K'. \quad (6.4.10)$$

Смысл этого уравнения ясен: в равновесии полная энергия минимальна, равновесие должно быть в первом приближении безразличным по отношению к любым перемещениям небольшого числа электронов с одного места на другое. Эти перемещения можно производить, взяв электрон в одном месте (r') и поместив его в другое место (r''), что даст условие

$$E_F(r') - e\varphi(r') = E_F(r'') - e\varphi(r''). \quad (6.4.11)$$

При этом r' и r'' любые, $r' - r''$ не должно быть малым.

Другой способ связан с перемещением всех электронов, находящихся в данной точке, на малое расстояние δr . Его рассмотрение приводит к уравнению равновесия в гидродинамической форме, с градиентом давления. Ясно, что обе формы условия равновесия должны быть эквивалентны.

Мы так подробно остановились на этом вопросе в связи с тем, что совершенно аналогичная ситуация имеет место для звезды как

целого; как мы увидим ниже, условие механического равновесия звезды эквивалентно условию постоянства суммы химического потенциала и гравитационного потенциала по всей звезде.

Вернемся к микромиру. Так как энергия Ферми просто выражается через плотность электронов, то получим (A, B — константы)

$$An^{2/3} - e\varphi = K', \quad n = B(K' + e\varphi)^{3/2}$$

и окончательное уравнение самосогласованного поля:

$$\Delta\varphi \equiv \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d\varphi}{dr} = c(K'' + \varphi)^{3/2} \quad (6.4.12)$$

выписано для нерелятивистского случая и $0 < r < r_1$; здесь c — известная константа, элементарно выражающаяся через \hbar, m, e , а $K'' = K'/e$ — константа, значение которой заранее не задано.

Граничные условия получаются из следующих соображений: в центре элементарной ячейки находится ядро с зарядом Ze , значит, при $r \rightarrow 0, \varphi \rightarrow \text{const} + Ze/r$. Внутри шара должны находиться Z электронов, так что $4\pi \int_0^R n(r)r^2 dr = Z$. Это условие приводит к тому, что ячейка в целом электронейтральна. Отсюда следует (в этом легко убедиться и формально из уравнения), что при $r = R \frac{d\varphi}{dr} = 0$. Второе граничное условие выполняется лишь при вполне определенном значении K' *).

Давление вещества равно давлению электронного газа на границе ячейки, т. е. оно известно, если мы знаем $n(R)$, которая выражается через $K' + e\varphi(R)$. На границе при $r = R$ электрическое поле равно нулю, ячейки взаимодействуют друг с другом только через давление. Можно показать, что такое наглядное определение совпадает с выражением давления через производную энергии по плотности.

Из анализа размерности следует, что результат можно представить в виде

$$P = B\bar{n}^{3/2} f \left[\frac{Ze^2}{R} / E_F(\bar{n}) \right]. \quad (6.4.13)$$

Здесь \bar{n} — средняя плотность электронов:

$$\bar{n} = 6 \cdot 10^{23} \frac{\rho Z}{A} = \beta \frac{\rho Z}{A}, \quad \beta = 6 \cdot 10^{23} \frac{1}{s};$$

*) К величине φ можно добавить произвольную постоянную; тогда K' уменьшается на соответствующую величину; сумма $K' + e\varphi$ определена однозначно.

A — атомный вес; $B\bar{n}^{1/3}$ — давление свободного вырожденного электронного газа (без учета изменения плотности за счет взаимодействия с ядром; выражение для $B\bar{n}^{1/3}$ приведено выше (6.2.16)); $f[y]$ — безразмерная функция, характеризующая влияние перераспределения заряда на давление. При этом ясно, что значение этой функции может быть только меньше единицы, так как плотность электронов на границе ячейки обязательно меньше средней.

Безразмерная f является функцией безразмерного отношения потенциальной энергии к кинетической:

$$y = \frac{Ze^2}{R} / E_F. \quad (6.4.14)$$

Вновь вместо точных значений энергии мы берем характерные значения на расстоянии R при средней плотности $\langle n \rangle$.

Выразим y через плотность, опуская все безразмерные множители:

$$\left. \begin{aligned} R &= (A/\beta\rho)^{1/3}, \\ E_F &= \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^{-2/3}}{m} = \hbar^2 \left(\frac{\beta Z \rho}{A} \right)^{2/3} / m, \\ y &= \frac{Ze^2 \left(\frac{\beta \rho}{A} \right)^{1/3} m}{\hbar^2 \left(\frac{\beta Z \rho}{A} \right)^{2/3}} = \frac{me^2 Z^{1/3} A^{1/3}}{\hbar^2 \beta^{1/3} \rho^{1/3}}. \end{aligned} \right\} \quad (6.4.15)$$

Поведение функции f в двух предельных случаях $y \ll 1$ и $y \gg 1$ можно предвидеть. В первом случае в пределе $f(0) = 1$, а следующий член разложения

$$f(y) = 1 - By$$

даст поправку, пропорциональную $\rho^{1/3}$ (ср. выше формулы § 3). Не столь очевиден другой предельный случай. Следует ожидать, что при данном размере ячейки при неограниченном увеличении заряда ядра Z давление стремится к вполне определенному пределу. Наглядная картина такова: мы увеличиваем заряд ядра и одновременно увеличиваем число электронов. При этом новые электроны садятся вблизи ядра и экранируют добавленный заряд, распределение зарядов вдали от ядра не меняется, стремится к определенному пределу при $Z \rightarrow \infty$. Этот принцип, подтверждаемый интегрированием уравнения*), приводит к следующему выводу: чтобы выражение для давления

$$P = \text{const} \cdot Z^{2/3} \rho^{2/3} f \left(\frac{Z^{1/3}}{\rho^{1/3}} \right)$$

*) При $Z \rightarrow \infty$ решение имеет асимптотический вид: $\Phi \sim r^{-4}$, $n(r) \sim r^{-6}$.

не зависело от Z в пределе $Z \rightarrow \infty$, надо, чтобы $f(y) = y^{-5}$ при $y \gg 1$. Но в таком случае

$$P = \text{const} \cdot \rho^{10/3}. \quad (6.4.16)$$

Любопытно, что такие качественные соображения дают асимптотический закон при не слишком высоком давлении, близкий к $P \sim \rho^3$. Закон $P \sim \rho^3$ был получен Ландау и Станюковичем (1945) для продуктов взрыва взрывчатых веществ. Тогда же Станюкович (см. [1971]) показал, что этот закон очень удобен для газодинамических расчетов. Эксперименты по сжатию железа и ряда других элементов в довольно широкой области давления (до ~ 10 млн. атм) приблизительно описываются близким уравнением

$$P = a(\rho^3 - \rho_0^3). \quad (6.4.17)$$

Расчеты уравнения состояния с помощью уравнения (6.4.13) все же грубы *). Оставаясь в рамках усредненного, коллективного описания электронов, можно учесть ряд поправок и значительно уточнить результат. Эта работа была проделана Калиткиным (1960) с использованием соображений Киржница, Компанейца, Павловского и др. Дальнейшее уточнение возможно лишь при рассмотрении индивидуальных орбит электронов и специфических химических свойств элементов.

Результат Калиткина (1960) сводится к выражению для давления в виде разности двух членов:

$$P = B \left(\frac{\rho Z}{A} \right)^{5/3} f \left(\frac{Z^{1/3} A^{1/3}}{\rho^{1/3}} \right) - c \left(\frac{\rho Z}{A} \right)^{4/3} \Phi \left(\frac{Z^{1/3} A^{1/3}}{\rho^{1/3}} \right), \quad (6.4.18)$$

где первый член совпадает с найденным раньше, а второй содержит поправки. Функции f и Φ см. в работе Калиткина (1960). Эта простая формула в среднем довольно хорошо описывает даже такую «деликатную» величину, как ρ_0 — плотность элементов при нормальных условиях.

На рис. 28 приводим заимствованный из работы Калиткина график, на котором сопоставлены вычисленная и измеренная

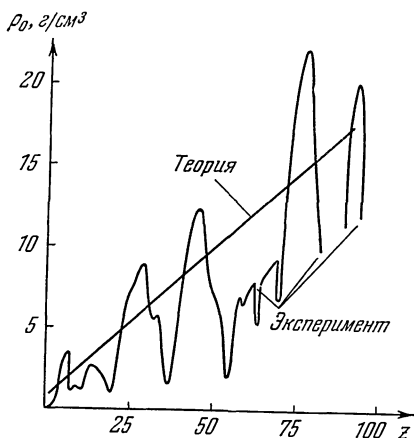


Рис. 28. Экспериментальная и теоретическая (статистическая) зависимость плотности несжатого вещества от заряда ядер.

*) Подробно теория самосогласованного поля изложена у Гомбаша (1950).

ρ_0 в зависимости от атомного номера Z . За пределами теории лежат только колебания, связанные с химической спецификой, периодические отклонения вверх и вниз. При давлении 5 ÷ 10 млн. атм они уже сильно сглажены.

Приводим также табл. II для нескольких элементов, заимствованную из работы Сальпетера (1961). В таблице дано отношение полного давления к давлению вырожденного газа (6.2.15), как функция параметра релятивизации x для фиксированных Z .

Таблица II

Отношение полного давления к давлению вырожденного газа

x	$\left(\frac{2}{\mu_e}\right) \rho \frac{z}{\text{см}^3}$	Z			
		2	6	12	26
0,05	$2,44 \times 10^2$	0,760	0,564	~0,3	—
0,1	$1,95 \times 10^3$	0,8802	0,7819	0,6705	~0,5
0,2	$1,56 \times 10^4$	0,9404	0,8906	0,8341	0,7308
0,3	$5,26 \times 10^4$	0,9604	0,9266	0,8882	0,8178
0,4	$1,25 \times 10^5$	0,9705	0,9445	0,9150	0,8607
0,5	$2,44 \times 10^5$	0,9765	0,9551	0,9303	0,8860
0,6	$4,21 \times 10^5$	0,9805	0,9620	0,9410	0,9024
0,7	$6,68 \times 10^5$	0,9833	0,9669	0,9482	0,9138
0,8	$1,00 \times 10^6$	0,9853	0,9705	0,9535	0,9221
1,0	$1,95 \times 10^6$	0,9881	0,9752	0,9605	0,9332
1,2	$3,37 \times 10^6$	0,9898	0,9782	0,9684	0,9401
1,4	$5,36 \times 10^6$	0,9909	0,9801	0,9677	0,9447
1,6	$8,00 \times 10^6$	0,9917	0,9844	0,9697	0,9479
1,8	$1,14 \times 10^7$	0,9922	0,9824	0,9711	0,9511
2,0	$1,56 \times 10^7$	0,9926	0,9831	0,9721	0,9519
2,5	$3,04 \times 10^7$	0,9932	0,9842	0,9738	0,9546
3,0	$5,26 \times 10^7$	0,9935	0,9848	0,9748	0,9562
4,0	$1,25 \times 10^8$	0,9938	0,9853	0,9757	0,9577
5,0	$2,44 \times 10^8$	0,9939	0,9856	0,9761	0,9585
7,5	$8,22 \times 10^8$	0,9939	0,9858	0,9765	0,9592
∞	∞	0,9939	0,9859	0,9768	0,9598

При больших Z и малых x , когда значение отношения меньше 0,5, данные расчетов ненадежны (правый верхний угол таблицы).

§ 5. Ядерные процессы и ядерное взаимодействие; влияние на уравнение состояния

В области плотности выше 10^3 г/см^3 уравнение состояния существенно зависит от ядерных процессов и взаимодействий. Можно поставить точную задачу о нахождении состояния с наименьшей энергией при каждой данной плотности барионов и нуле температуры. Энергия есть сумма энергии ядер и энергии