

混合物原子结构的自洽场计算*

孟续军¹⁾ 宗晓萍²⁾ 白云¹⁾ 孙永盛¹⁾ 张景琳¹⁾

¹⁾ 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

²⁾ 河北大学电信学院, 保定 071002)

(2000 年 3 月 8 日收到, 2000 年 6 月 4 日收到修改稿)

基于含温有界 Hartree-Fock-Slater 相对论自洽场平均原子模型, 应用体积相加原理, 计算混合物的原子结构. 给出了求解混合物的 Thomas-Fermi 方程以及自洽场原子结构的方法, 并就一些计算结果作了讨论.

关键词: 混合物, 原子结构, Thomas-Fermi 模型

PACC: 3110, 3115, 3120L, 5225

1 引 言

由单种元素构成的纯净物质, 可能由于自发衰变, 产生一定量的其他元素, 形成混合物; 或者由于容器物质扩散产生混合物; 当然工业合金、常见的化工合成材料等都是这里所考虑的混合物. 纯净的物质中若加入了杂质就会影响物质的辐射特性. 混合物原子结构问题的研究有着极其广泛的工程应用背景, 是高级阶段研究的重要基础. 目前, 多采用平均原子模型来解决混合物的原子结构问题, 但未见完整理论的发表. Gilvarry^[1]的方法只适合特殊的化合物. 对一般的化合物和混合物, 徐锡申等人^[2]介绍了求解混合物 Thomas-Fermi (TF) 势的数值方法和作图法, 并指出方法复杂、计算量庞大. 本文采用牛顿叠代法进行循环打靶计算, 有效地求解了混合物的 TF 势, 并以该势作为初始势, 求解了混合物原子的相对论自洽场原子结构. 本文全部采用原子单位.

2 理 论

2.1 混合物质的 TF 模型

2.1.1 混合物质的构成

假定混合物中含有多种元素, 其原子量分别为 A_1, A_2, A_3, \dots , 质量百分比为 W_1, W_2, W_3, \dots , 那么混合物中各元素粒子个数比 n_1, n_2, n_3, \dots 应由下式决定, 即

$$n_i = (W_i/A_i) / \sum_j (W_j/A_j). \quad (1)$$

根据平均原子模型的要求, 若干种元素应按照 (1) 式提供的百分比构成一个具有代表性的“混合”原子. 这个原子要求参与混合的各个原子间满足混合平衡条件: 混合物中的各个原子压强相同、温度相同; 各个原子中电子化学势相同、总电子数守恒. 在这 4 个平衡条件中, 压强、温度相同必须得到充分保证. 在恒定的温度、压强下, 混合物中各种成分的内密度无法控制.

“混合”原子的平均原子量 A 为

$$A = \left(\sum_i W_i A_i^{-1} \right)^{-1}. \quad (2)$$

若混合物的物质密度为 D , 根据 TF 理论, 等体积分割物质后, 将其等效为一个“原子胞”. 该原子胞即“混合”原子的 Wigner-Seitz 半径为

$$R_0 = 1.388208787 (A/D)^{1/3}. \quad (3)$$

根据体积相加模型的基本假设: 在压强温度相等的条件下; “混合”原子的体积 V 为各原子的体积 V_i 之和, 那么“混合”原子的 Wigner-Seitz 半径 R_0 与参加混合的各原子的 Wigner-Seitz 半径 R_i 之间有下列关系:

* 中国工程物理研究院科学基金(批准号 990223)和国家高科技惯性约束聚变基金资助的课题.

$$V = \sum_i n_i V_i, \quad \sum_i n_i R_i^3 = R_0^3. \quad (4)$$

2.1.2 混合物 TF 模型的求解

混合物的原子结构计算的核心问题是单种元素原子结构的计算,混合物中的各原子以压强、化学势、温度相等为约束条件,相互影响着自身的原子结构,其中首先影响组分原子的微观半径.作为混合物元素 Hartree-Fock-Slater 自洽场原子结构计算的起动力和自由电子的统计势,混合物 TF 方程的求解起着相当重要的作用.

考虑混合物中的第 i 种元素,可设其 Wigner-Seitz 半径为 R_i ,其 TF 方程可以写为

$$\begin{aligned} \phi_i(x) &= \alpha_i x I_{1/2}(\phi_i(x) \mathcal{V} x); \\ \alpha_i &= \frac{2^{5/2} T^{1/2} R_i^2}{\pi}, \quad x = r_i/R_i. \end{aligned} \quad (5)$$

边界条件为

$$\phi_i(1) = \phi_i(0) = \mu_i/T, \quad \phi_i(0) = Z_i/(R_i T). \quad (6)$$

在原子边界 R_i 处,原子的压强为

$$P_i = \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} T^{5/2} I_{3/2}(\phi_i(1)). \quad (7)$$

可以看到(7)式既不显含体积参量,也不显含原子序数,只是温度 T 和无量纲势函数 $\phi_i(1)$ 的函数.所以,混合物内各原子只要压强相等、温度相等,就一定导致电子的化学势相等,这正是混合物内各原子的平衡条件.混合元素的 TF 方程组的求解与普通 TF 方程的解法大不相同,它不仅要保证各个原子具有统一的化学势 μ ,还要找到一组恰当的原子半径 $\{R_i\}$,使之满足(4)式.下面开始求解:首先给定一个共同的化学势 μ ,不同的原子将会有不同的原子半径 R_i .由于此时的 R_i 并不是期望值,在做由外向里的打靶计算时,实际得到的 TF 势靶值 $\phi_i(0)$ 与它的定义值 $Z_i/(R_i T)$ 有较大的差别.只有当 $\phi_i(0)$ 与 $Z_i/(R_i T)$ 值完全一致时,这样的 R_i 才是满足方程的解.基于这样的计算思路,设满足(5)式和边界条件的解满足方程

$$F(R_i) = \ln \phi_i(0) - \ln(Z_i/(R_i T)) = 0, \quad (8)$$

采用牛顿叠代法,得 R_i 的第 $s+1$ 次的叠代值

$$\begin{aligned} R_i^{(s+1)} &= R_i^{(s)} - (\ln \phi_i^{(s)}(0) - \ln(Z_i/(R_i^{(s)} T))) \\ &\quad \cdot \left(\frac{\partial \phi_i^{(s)}(0)}{\partial R_i} (\phi_i^{(s)}(0))^{-1} + \frac{1}{R_i^{(s)}} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (9)$$

其中 (s) 表示第 s 次打靶计算时,所得的各种参数.当 $|(R_i^{(s+1)} - R_i^{(s)})/R_i^{(s)}| \leq \delta (\delta = 10^{-5})$ (10) 时, $R_i^{(s+1)}$ 就是第 i 种元素在该试探化学势 μ 下的

原子半径. $\frac{\partial \phi_i^{(s)}(0)}{\partial R_i}$ 由下列方程求得.令 $\zeta_i(x) = \frac{\partial \phi_i(x)}{\partial R_i}$,将(5)式及边界条件(6)式对 R_i 求导,得

$$\begin{aligned} \zeta_i'(x) &= \frac{2}{R_i} \alpha_i x I_{1/2}(\phi_i(x) \mathcal{V} x) \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_i \zeta_i(x) I_{-1/2}(\phi_i(x) \mathcal{V} x), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\zeta_i'(1) = \zeta_i(1) = 0.$$

该式应与 TF 方程组联立求解,便可得 $\zeta_i(0)$,即 $\frac{\partial \phi_i(0)}{\partial R_i}$,这样才能完成一次对 R_i 的叠代.

在上述求解 R_i 的叠代过程中,涉及到两个 Fermi 积分 $I_{1/2}$ 和 $I_{-1/2}$.解两个联立的二阶常微分方程组,计算量很大,而且还要进行叠代计算.若对(11)式作简要分析,不难看出 $\zeta_i(0)$ 是恒正的.令

$$\alpha_i^{(s)} = \left(\frac{1}{\phi_i^{(s)}(0)} \frac{\partial \phi_i^{(s)}(0)}{\partial R_i} + \frac{1}{R_i^{(s)}} \right)^{-1}, \quad (12)$$

把(9)式改写为

$$R_i^{(s+1)} = R_i^{(s)} - \alpha_i^{(s)} (\ln \phi_i^{(s)}(0) - \ln(Z_i/(R_i T))). \quad (13)$$

我们所关心的是 $\alpha_i^{(s)}$ 是一个正数,根本不必管它到底是多少,也就没有必要去真正求解(11)式.这样可以大大减小计算量.但是 $\alpha_i^{(s)}$ 的大小直接关系到叠代计算的反馈量,若 $\alpha_i^{(s)}$ 太小,反馈量不足,会使叠代次数增多;若 $\alpha_i^{(s)}$ 太大,反馈量过大,会造成叠代振荡发散.总之, $\alpha_i^{(s)}$ 的选取是动态的,只有在计算过程中根据叠代的实际情况,边叠代边自动调节,使 $\alpha_i^{(s)}$ 达到临界值,使叠代过程介于振荡与不振荡之间,才能把叠代次数降到最低.

以上完成的 R_i 计算,仅仅是在某次试探值 μ 下给出了各原子半径,因此还必须进行化学势 μ 的叠代计算,通过 μ 的调节,使得 R_i 满足(4)式.由(6)式可得各原子半径为

$$R_i = \frac{Z_i}{\phi_i(0)T}, \quad (14)$$

把半径约束条件(4)式改写成化学势 μ 的隐函形式 $G(\mu)$,即

$$G(\mu) = \sum_i n_i \frac{Z_i^3}{\phi_i^3(0)T^3} - R_0^3 = 0, \quad (15)$$

仍采用牛顿叠代法,求出 μ 的叠代公式:

$$\begin{aligned} \mu^{(m+1)} &= \mu^{(m)} + \frac{\sum_i n_i R_i^{(m)3} - R_0^3}{3 \sum_i n_i R_i^{(m)3} \frac{1}{\phi_i^{(m)}(0)} \frac{\partial \phi_i^{(m)}(0)}{\partial \mu}}, \end{aligned} \quad (16)$$

其中 $R_i^{(m)}$ 为第 m 次对 μ 叠代计算时, 由 R_i 叠代计算终了时给出的一组半径 $\{R_i\}$, $\phi_i^{(m)}(0)$ 也是在 $\mu^{(m)}$ 下求解出的参数. 当第 $m+1$ 次计算出的 $\mu^{(m+1)}$ 与第 m 次计算出的 $\mu^{(m)}$ 满足下面判据时:

$$\left| \frac{\mu^{(m+1)} - \mu^{(m)}}{\mu^{(m)}} \right| \leq \Delta (= 10^{-5}), \quad (17)$$

化学势 μ 的叠代求解才告结束. (16) 式中 $\frac{\partial \phi_i^{(m)}(0)}{\partial \mu}$

由下列方式获得. 令 $W_i(x) = \frac{\partial \phi_i(x)}{\partial \mu}$, 将 (5) 式及其边界条件对 μ 求导, 得

$$W_i''(x) = \frac{1}{2} a_i W_i(x) I_{-1/2}(\phi_i(x) \chi(x)), \quad (18)$$

$$W_i'(1) = W_i(1) = 1/T.$$

在给定的第 m 次 $\mu_i^{(m)}$ 下, 与 (5) 式联立求解, 可得

到 $W_i^{(m)}(0)$, 即 $\frac{\partial \phi_i^{(m)}(0)}{\partial \mu}$. 略对 (18) 式分析便可知, $W_i^{(m)}(0)$ 恒正. 这样可以令

$$\beta^{(m)} = \left(3 \sum_i n_i R_i^{(m)3} \frac{W_i^{(m)}(0)}{\phi_i^{(m)}(0)} \right)^{-1}, \quad (19)$$

(16) 式可以改写为

$$\mu^{(m+1)} = \mu^{(m)} + \beta^{(m)} \left(\sum_i n_i R_i^{(m)3} - R_0^3 \right). \quad (20)$$

同样, $\beta^{(m)}$ 也是反馈量调节因子, 不必具体计算, 它应该根据 μ 叠代计算过程的实际情况自动调节, 使叠代计算处于振荡与不振荡的临界状态, 叠代次数就会降到最少. 在物质温度一定的情况下, 半径大的原子球给出的化学势较小; 反之, 化学势大的 TF 模型给出的原子半径较小. 由于事先不可能知道混合物中各原子的可能半径和化学势, 有时给出的化学势会导致原子半径过大而使整个计算过程失败. 下面给出混合物中各原子半径及电子化学势的初始条件. 把混合后的物质看成是一种物质, 其原子量为 $\sum_i n_i A_i$, 原子序数为 $\sum_i n_i Z_i$. 这种近似完全适合于原子序数 Z_i 较接近的混合物. 由于混合物已等效成纯种物质, 可以用单元素的 TF 模型求解. 这样, 所有元素的原子半径初始值取混合物的 Wigner-Seitz 半径 R_0 , 化学势初始值取方程解出的化学势. 因为混合物中各原子的半径只是在 R_0 附近有所修正, 化学势 μ 也只是在上述方程给出的初始值附近作较小的修正, 这样使整个混合元素 TF 模型求解速

度大大加快. 最后混合物中各原子的 TF 势由下式给出:

$$V_i^{\text{TF}}(r) = T \frac{\phi_i(x)}{x} - \mu. \quad (21)$$

2.2 混合物质的 HFS 自洽场原子结构

混合物质的 TF 方程求解远比单种原子的 TF 方程求解要复杂得多, 而混合物质的 HFS 自洽场原子结构求解比单原子结构求解更复杂. 混合物中的各原子要满足较多的约束条件: 化学势、压强、温度相等, 电子数守恒及体积固定等一系列的物理要求. 由于这些物理要求大多数不能写成显式表示, 有些甚至是隐含在超越函数中, 这就大大增加了严格求解混合物 HFS 自洽场原子结构的困难. 为了使求解方法变得有效实用, 必须在约束条件上作些放松和简化, 并利用已有的单原子的 HFS 自洽场原子结构的求解方法. 根据对约束条件的不同强调, 可设计出三种处理混合物 HFS 自洽场原子结构的方法. 第一种方法满足的约束条件最强, 所以较简单. 该条件是: 混合物内各原子压强、温度、化学势相等, 各原子呈电中性. 其余方法我们将陆续发表.

回顾相对论 Dirac 单分量 HFS 自洽场原子结构的求解过程, 很容易写出混合物中第 k 种原子所要满足的主要方程.

Dirac 单分量径向方程为

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 G_i^{(k)}}{dr^2} - \frac{\alpha^2/2}{1 + \alpha^2(\epsilon_i^{(k)} + V^{(k)})} \frac{dV^{(k)}}{dr} \frac{dG_i^{(k)}}{dr} \\ & + \left[2(\epsilon_i^{(k)} + V^{(k)}) - \frac{K_i(K_i + 1)}{r^2} + \alpha^2(\epsilon_i^{(k)} + V^{(k)})^2 - \frac{\alpha^2/2}{1 + \alpha^2(\epsilon_i^{(k)} + V^{(k)})} \frac{dV^{(k)}}{dr} \frac{K_i}{r} \right] \\ & \cdot G_i^{(k)} = 0. \end{aligned} \quad (22)$$

束缚电子数密度 $\rho_b^{(k)}(r)$ 为

$$\begin{aligned} \rho_b^{(k)} &= \frac{1}{4\pi r^2} \sum_i N_i^{(k)} G_i^{(k)}(r); \\ N_i^{(k)} &= \frac{2|K_i|}{\exp((\epsilon_i^{(k)} - \mu^{(k)})/T) + 1}, \end{aligned} \quad (23)$$

其中 $\mu^{(k)}$ 为第 k 个原子的化学势.

自由电子数密度 $\rho_1^{(k)}(r)$ 由 Fermi-Dirac 分布给出

$$\rho_i^{(k)}(r) = \frac{1}{\pi^2} \int_{p_0^{(k)}(r)}^{\infty} \frac{p^2 dp}{\exp((\sqrt{p^2 c^2 + c^4} - c^2 - V^k(r) - \mu^{(k)})/T) + 1}, \quad (24)$$

$$p_0^{(k)}(r) = \sqrt{2V^k(r) + V^{(k)}(r) c^2}. \quad (25)$$

本方法中必须规定约束条件:混合物中各原子的 Wiger-Seitz 半径 $R_0^{(k)}$ 一经混合元素的 TF 方程确定之后就不再随求解 HFS 自洽场原子结构的过程变化,要求混合物中各原子呈电中性.这种约束条件很强,它忽略了各原子间压强的平衡,也不能保证各原子的化学势 $\mu^{(k)}$ 严格相等.但它的优点是混合物 HFS 自洽场原子结构的求解变成了单个原子 HFS 自洽场原子结构求解的若干次重复.为了保证各原子电中性条件的成立,各个原子必须调节各自的化学势 $\mu^{(k)}$,以保证

$$\sum_i N_i^{(k)} + \int_0^{R_0^{(k)}} \rho_i^{(k)}(r) 4\pi r^2 dr = Z^{(k)} \quad (26)$$

成立.完成守恒条件检验后,库仑关联势 $V_C^k(r)$, 交换势 $V_{ex}^k(r)$, 电子关联势 $V_{corr}^k(r)$ 可由文献 [3] 给出.合成的原子势 $V^k(r)$ 为

$$V^k(r) = V_C^k(r) + V_{ex}^k(r) + V_{corr}^k(r). \quad (27)$$

这样的势 $V^k(r)$ 重新参加自洽场的叠代过程,比较详细的解法可参阅文献 [4],直至解完该原子结构为止,然后进行下一个原子结构的计算过程,把所有的原子结构解完.

由于每个原子的半径不再调整,原子结构的自洽场计算是通过调节各自的化学势来完成的.当整个“混合”原子结构计算完毕后,各自的化学势会略有差异.在统一使用时,把各自的化学势作处理.令

$$\mu = \frac{\sum_k n_k Z^{(k)} \mu^{(k)}}{\sum_k n_k Z^{(k)}} \quad (28)$$

作为“混合”原子的化学势.

3 讨论与结论

为了检验理论的可靠性,首先把混合物退化为单纯物质,与国际上已经公开的结果进行比较,检查本文理论的精度.从表 1 可以看到,计算结果的相对误差小于 1%.其次,针对 Au(70%) + Gd(30%) 混合物作了大量的计算,就混合原子结构中较重要的物理参量作一些分析.在本文给出的数据表中温度 T 的单位为 eV,密度 D 的单位为 g/cm^3 ,其余均采

用 a. u. Au* Gd* 表示纯净的元素.从图 1 可以看到:混合物中各组分的化学势差别不大,但随着密度的加大,偏离偏差逐渐增大.这说明简单的混合的原子结构精度尽管有限,但在大的物理范围内的结果是满足要求的.表 2 给出不同温度密度下,混合物中各组分原子的半径比较.从中看到,即使混合物的组分

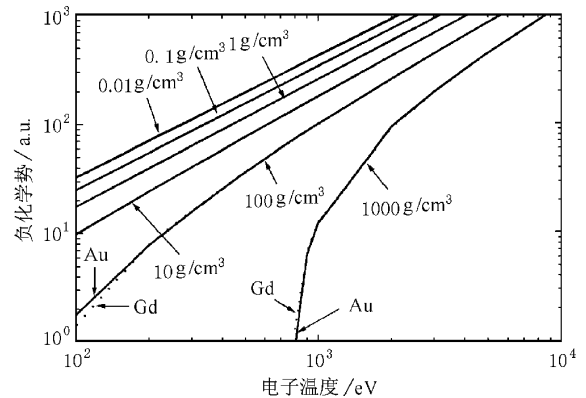


图 1 Au(70%) + Gd(30%) 混合物中组分原子化学势的比较

比例不变,密度也不变,组分原子的半径还是随着温度的变化而变化.一种组分的原子半径随温度增加而增加,另一组分的原子半径就会减小,这与物质的组分密度无关.这是一个不可事先知道的物理量.和纯净物质原子半径相比则有更大的差别.只有在高密度的情况下原子半径才没有较大的差别.表 3 给出在一定温度 $T = 500 \text{ eV}$ 、密度 $D = 20 \text{ g}/\text{cm}^3$ 下 Au + Gd 混合物在不同重量比的情况下各组分原子半径 R 、化学势 μ 、离化度 N_f 以及内壳层能级的比较(注意 Au 的重量比顺序与 Gd 正好相反).可以看到,组分比例的改变还是引起了原子结构参数的改变,特别是原子的内壳层的能级在重量比不同的情况下,极端改变将近 37 eV.那么对外壳层的影响会更大.然而,最受影响的参量是化学势,极端改变将近 44 eV.这对微观物理过程的影响不可忽视.通过以上简单分析大致对混合物原子结构求解有一个了解,更精确的求解要放宽约束条件,进行更完备的自洽场方法计算,简单地用单元素结果进行“配方”模拟混合物会造成较大的误差.

表 1 Rb 元素前 10 个能级的比较表 $T=100 \text{ eV}$, $D=1.532 \text{ g/cm}^3$

能级	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3s_{1/2}$	$3p_{1/2}$	$3p_{3/2}$	$3d_{3/2}$	$3d_{5/2}$	$4s_{1/2}$
文献 [3]	-573.72	-88.497	-81.809	-79.623	-21.766	-19.323	-18.905	-14.785	-14.707	-6.3856
Opinch*	-570.39	-88.029	-81.498	-79.191	-21.768	-19.373	-18.941	-14.864	-14.778	-6.4070
误差/%	0.6	0.5	0.4	0.5	0.0	0.3	0.2	0.5	0.5	0.3

* Opinch 是本文计算混物质辐射不透明度的程序,包括了混物质的原子结构程序.

表 2 Au(70%)+Gd(30%) 混合物中各组分的原子半径比较

T	D		0.001	0.01	0.1	1.0	10.0	100.0	1000.0
100.0		Au	60.50	36.90	17.10	7.94	3.69	1.710	0.800
		Gd	59.05	36.05	16.76	7.785	3.61	1.667	0.767
		Au*	80.78	37.49	17.40	8.08	3.75	1.740	0.808
		Gd*	74.94	34.783	16.145	7.494	3.48	1.614	0.749
200.0		Au	60.70	37.00	17.10	7.95	3.69	1.720	0.800
		Gd	58.73	35.87	16.69	7.76	3.60	1.670	0.77
400.0		Au	60.90	37.10	17.20	7.97	3.70	1.720	0.800
		Gd	58.29	35.61	16.58	7.72	3.59	1.660	0.767
800.0		Au	61.10	37.20	17.30	8.00	3.71	1.720	0.800
		Gd	57.83	35.32	16.44	7.66	3.57	1.657	0.766
1600.0		Au	61.30	37.30	17.30	8.03	3.72	1.720	0.800
		Gd	57.49	35.09	16.32	7.60	3.54	1.650	0.765
3000.0		Au	61.30	37.40	17.40	8.05	3.73	1.730	0.800
		Gd	57.33	34.98	16.25	7.55	3.52	1.640	0.762

表 3 不同重量比的 Au+Gd 混合物中各组分原子的半径 R 、化学势 μ 、离化度 N_f 以及内壳层能级 (eV) 的比较 (注意 Au 的重量比顺序与 Gd 正好相反) $T=500 \text{ eV}$, $D=20 \text{ g/cm}^3$

Gd 重量比		0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
	R	2.869	2.856	2.844	2.831	2.819	2.807	2.795	2.783	2.772
	μ	-64.44	-64.22	-64.00	-63.77	-63.56	-63.35	-63.15	-62.95	-62.75
Gd	N_f	32.76	32.70	32.65	32.65	32.61	32.56	32.51	32.46	32.42
	$1s_{1/2}$	-51545	-51541	-51536	-51531	-51527	-51522	-51518	-51513	-51509
	$2s_{1/2}$	-9496	-9491	-9486	-9482	-9477	-9473	-9468	9464	-9460
Au 重量比		0.9	0.8	0.7	0.6	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1
	R	2.962	2.949	2.936	2.923	2.910	2.898	2.886	2.874	2.862
	μ	-64.51	-64.29	-64.08	-63.87	-63.67	-63.47	-63.26	-63.07	-62.88
Au	N_f	36.11	36.05	35.99	35.93	35.87	35.81	35.76	35.70	35.64
	$1s_{1/2}$	-82434	-82429	-82425	-82420	-82416	-82411	-82407	-82402	-82397
	$2s_{1/2}$	-15674	-15670	-15665	-15660	-15656	-15651	-15647	-15643	-15638

- [1] J. J. Gilvarry , *Phys. Rev.* **105** (1957) 579. [1986] 第 231 页]
- [2] X. S. Xu , W. X. Zhang *et al.* , Introduction to Practical Theory of EOS (Science Press , Beijing , 1986) , p. 231 (in Chinese) [徐锡申、张万箱等 , 实用物态方程理论导引 (科学出版社 , 北京 , 1986) 第 231 页]
- [3] B. F. Rozsnyai , *Phys. Rev.* **A5** (1972) , 1137.
- [4] X. J. Meng , Y. S. Sun , *Acta Physica Sinica* **A3** (1994) , 345 (in Chinese) [孟续军、孙永盛 , 物理学报 **A3** (1994) , 345]

SELF-CONSISTENT CALCULATION OF ATOMIC STRUCTURE FOR MIXTURE *

MENG XU-JUN¹⁾ ZONG XIAO-PING²⁾ BAI YUN¹⁾ SUN YONG-SHENG¹⁾ ZHANG JING-LIN¹⁾

¹⁾ (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100088 , China*)

²⁾ (*Telecommunication College , Hebei University , Baoding 071002 , China*)

(Received 8 March 2000 ; revised manuscript received 4 June 2000)

ABSTRACT

Based on relativistic Hartree-Fock-Slater self-consistent average atomic model , atomic structure for mixture is studied by summing up component volumes in mixture. Algorithmic procedure for solving both the group of Thomas-Fermi equations and the self-consistent atomic structure is presented in detail and some numerical results are discussed.

Keywords : mixture , atomic structure , Thomas-Fermi model

PACC : 3110 , 3115 , 3120L , 5225

* Project supported by the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 990223) and the Inertial Confinement Fusion Foundation of the China National High Technology Development Program.