

一种含势阱具有混合交换势形式的平均原子模型^{*}

贾洪祥[†] 孟续军

(北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

(2004 年 3 月 5 日收到, 2004 年 6 月 9 日收到修改稿)

对传统的简单平均原子模型(AAM)作了改进: 1. 使用了动态自由电子判据; 2. 将自由电子分为三种类型, 分别用分波法和统计方法加以处理; 3. 应用变分原理给出了一种混合形式的交换势取代了 Slater 势; 4. 应用材料常数常数标定了原子结构中的参数. 作为算例, 计算并与实验比较了 Fe, Ni, Cu 的零温电子压强.

关键词: 平均原子结构, 交换势, 电子压强

PACC: 3120, 3120G, 5225K

1. 引 言

含温有界平均原子模型是研究高温稠密等离子体物理特性的重要工具之一. 由于高温等离子体内部存在大量的离子类型, 逐一计算这些离子类型的离子结构显然不现实, 于是统计模型被用来处理这方面的问题, 比如等离子体的辐射不透明度和状态方程等. 随着计算机的进步, 早期的统计模型比如 TF 模型及其各种修正的模型^[1](TFD, TFK, TFS)逐渐被更高级的自洽场模型所取代. 1968 年, Zink^[2]在 TF 模型中尝试引进了原子的壳层效应; 1972 年 Rozsnyai^[3]在此物理思想的基础上, 将相对论 TF 模型改造成了能够计算任意温度与物质密度的自洽场平均原子结构模型, 并简单计算了等离子体的电子压强, 奠定了平均原子模型在等离子体研究中的地位. 为了满足高温稠密等离子体辐射不透明度研究的需求, 又发展出了形形色色的适合高温稠密范围的平均原子模型^[4-6], 在应用中取得了较大的成功. 但是平均原子模型在对低温等离子系统的物性研究方面存在较大的缺陷. 因为, 随着等离子体温度的降低或密度的增高, 等离子体内的离子类型逐渐减少, 其热力学统计出现很大的偏差; 而且, 当温度降低到一定程度, 平均原子将过渡到真实的原子并呈现固态位形结构, 这一点, 简单平均原子模型做不到. 1979 年, Liberman 为了研究稠密物质的状态方

程, 设计了另一种平均原子模型^[4]. 由于在模型里考虑了等离子体的离子环境, 引进了背景电子和离子的贡献, 所计算的镍、铜、锌三种材料的零温状态方程非常符合实验^[4]. 1994 年, Liberman 在他的自洽场模型里采用修正的局域密度泛函近似处理高温稠密等离子体的离子结构, 并进行高温稠密等离子体状态方程的研究^[5]. 这样看来, 使用改进后的平均原子模型处理等离子体物性问题仍不失为一种有效的方法. 本文描述的就是在改进简单平均原子模型方面所作的工作. 本文使用原子单位.

2. 理 论

考虑到密度效应在状态方程研究中占有特别重要的地位, 应该对平均原子结构模型^[6]进行特别的改进. 受到压缩的原子, 原子间的电子势必然发生重叠. 虽然静电库仑势在原子胞处恒为零, 但不同原子间的电子存在交换作用, 等效为一个吸引势, 相当于在等离子体内存在一个均匀的“势阱”. 这个势阱对电子没有力的作用, 等效地降低了势对电子的束缚(见图 1). 压缩得越厉害, 势降低得就越多.

通过对原子结构的修改, 使得计算出的自由电子数不再随密度发生“跳跃式”的巨变, 壳层的变化平缓了许多, 更加符合等离子体的统计行为. 在原子结构计算中引进一个由于压缩导致的势阱, 动态改变自由电子判据, 使一些束缚电子成为准自由电

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10174010)和冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室基金(批准号: 51478030203ZW0902)资助的课题.

[†] E-mail: jia_hongxiang@iapcm.ac.cn, 电话: 010-62014411-2393.

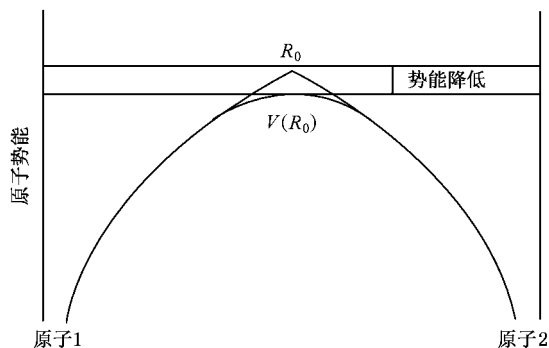


图 1 等离子体密度效应(有限半径)引起的势能降低,弱化了核
对电子的束缚

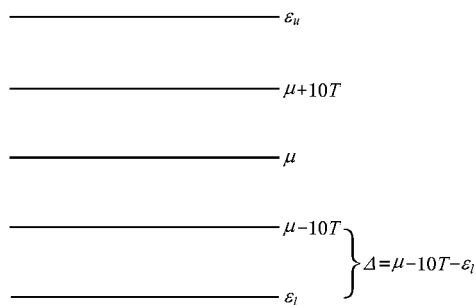


图 2 能带上下限与温度和化学势的关系

子,产生压致电离或导电,在定性上描述绝缘体的压致电离现象。虽然这样还没有完全消除压致电离度的“间断跳跃”,但一定程度上降低了压致离化的难度。

在有界原子结构中考虑能带效应,即在简单平均原子模型^[6]的基础上计算两类不同的波函数边界条件,获得能带的上下限。通常外壳层会自动劈裂为连续的能带。在物质受到压缩的过程中,势阱连续下降,能带连续升高,从而使得压致离化连续进行,彻底消除了压致离化度的间断跳跃现象。

电子占据数由 Fermi-Dirac 统计获得。当 Fermi 能级介于能带之间时(见图 2),电子数的占据概率为

$$f_A = \frac{\epsilon_{\min}}{\epsilon_u - \epsilon_l} + \frac{T}{\epsilon_u - \epsilon_l} \int_{\max(-10\{\epsilon_l - \mu\}T)}^{\min(10\{\epsilon_u - \mu\}T)} \frac{dy}{\exp(y) + 1}, \quad (1)$$

其中 ϵ_u 与 ϵ_l 分别是第 A 轨道能带的上下限,

$$\epsilon_{\min} = \mu - \epsilon_l - 10T \leq -V(R_0), \quad (2)$$

其中 $-V(R_0)$ 是等效势阱的深度。

在简单的平均原子模型中,自由电子密度一般采用 Fermi-Dirac 统计计算,束缚电子密度通过径向波函数计算。由于判断自由电子使用了经典判据,在束缚电子密度分布和自由电子密度分布之间存在“间断”。温度越低,间断区越宽。严格来讲,最好用分波法处理自由电子。

$$4\pi r^2 \rho_f(r) = \int_{\epsilon_0}^{\infty} \frac{d\epsilon}{\exp((\epsilon - \mu)/T) + 1} \times \sum_{l=0}^{\infty} \chi(2l+1) P_{el}^2(r), \quad (3)$$

其中 $P_{el}(r)$ 是按能量归一化的径向波函数。由于分波数无限,可以把分波从 l_0 处分开,只计算有限的分波数,把高于 l_0 的分波用统计处理

$$4\pi r^2 \rho_f(r) = \int_{\epsilon_0}^{\infty} \frac{d\epsilon}{\exp((\epsilon - \mu)/T) + 1} \times \sum_{l=0}^{l_0} \chi(2l+1) P_{el}^2(r) + \frac{4r^2}{\pi} \times \int_{\epsilon_0}^{\infty} \frac{\sqrt{\chi(\epsilon + V(r)) - l_0(l_0 + 1)r^2} d\epsilon}{\exp((\epsilon - \mu)/T) + 1}, \quad (4)$$

其中 l_0 为分波界限。小于 l_0 的电子可以称为共振电子,大于 l_0 的分波归并为 Fermi-Dirac 统计,是统计意义上的自由电子, $\epsilon_0 = -V(R_0)$ 是自由电子的判据。一般经验认为:当 ϵ_0 较小时高分波不存在。现在不能认为等离子体高分波在低能时对电荷密度分布没有贡献。这样自由电子可用三部分进行描述:

$$4\pi r^2 \rho_f(r) = \sum_{l=0}^{l_0} \chi(2l+1) \int_{\epsilon_l}^{\infty} \frac{P_{el}^2(r) d\epsilon}{\exp((\epsilon - \mu)/T) + 1} + \sum_{l=0}^{l_0} \chi(2l+1) \int_{\epsilon_0}^{\epsilon_l} \frac{P_{el}^2(r) d\epsilon}{\exp((\epsilon - \mu)/T) + 1} + \sum_{l=l_0+1}^{\infty} \chi(2l+1) \int_{\epsilon_0}^{\infty} \frac{P_{el}^2(r) d\epsilon}{\exp((\epsilon - \mu)/T) + 1}, \quad (5)$$

其中,第一项代表完全自由的分波,第二项代表完全不自由的分波,即从能量的角度应该是自由电子,但从径向波函数的角度看却无法到达原子边界,第三项为未加区分自由与否的高分波; ϵ_l 是自由分波的

判据

$$\varepsilon_l = \frac{\mathcal{K}(l+1)}{2R_0^2} - V(R_0). \quad (6)$$

经过比较复杂的 WKB 统计处理后 (5) 式化为

$$\begin{aligned} & 4\pi r^2 \rho_l(r) \\ &= \sum_{l=0}^{l_0} \mathcal{X}(2l+1) \int_{\varepsilon_l}^{\varepsilon_{l_0}} \frac{P_{\varepsilon_l}^2(r) d\varepsilon}{\exp((\varepsilon - \mu)YT) + 1} \\ &+ \frac{4r^2}{\pi} \sum_{l=1}^{l_0} \int_{\varepsilon_{l-1}}^{\varepsilon_l} \frac{\sqrt{\mathcal{X}(\varepsilon + V(r)) - \mathcal{K}(l+1)r^2} d\varepsilon}{\exp((\varepsilon - \mu)YT) + 1} \\ &+ \frac{4r^2}{\pi} \int_{\varepsilon_{l_0}}^{\infty} \frac{\sqrt{\mathcal{X}(\varepsilon + V(r))} d\varepsilon}{\exp((\varepsilon - \mu)YT) + 1}. \quad (7) \end{aligned}$$

这样就自由电子按一定的能量和分波区分开来,即低于 ε_l 的分波用分波法处理,高于 ε_{l_0} 和 l_0 的分波用统计方法处理,避免了分波法计算量太大的问题。

简单平均原子模型比较适合研究等离子体的辐射问题,因为内壳层的计算精度高,但平均原子计算出的外壳层结果并不好,原因之一是电子交换势形式比较粗糙,等离子体状态方程的研究虽然也依赖整个原子结构的精度,但更依赖外壳层的精度。一般来说,低温等离子体的电子压强更直接依赖外壳层和交换势,通过状态方程的校检,可以获得较高精度的原子结构。本文采用严格的 Hartree-Fock 能量计算公式计算束缚电子的交换能,应用含温度的平面波统计计算束缚-自由、自由-自由电子间的交换能,然后再对总电子数密度统一变分,获得混合形式的交换势,即在原子胞内,全部电子交换能为

$E_x = \int \varphi_x(r) dr$, 其中 $\varphi_x(r)$ 为交换能密度,表达式为

$$\begin{aligned} \varphi_x(r) = & -\frac{1}{8\pi} \sum_A \sum_B q_A q_B \sum_{\nu} \frac{1}{2} \Gamma_{j_A} \nu_{j_B} \\ & \times G_A(r) G_B(r) Y_{\nu}(A, B; ir) \frac{1}{r^3} \\ & - \frac{T^2}{2\pi^3} \left\{ \int_{-\infty}^{\xi_0} [I_{1/2}(t)] dt \right. \\ & + \int_{\xi_0}^{\xi} \left(\int_0^{\infty} \frac{(\alpha + t - \xi_0)^{-1/2} d\alpha}{\exp(\alpha - \xi_0) + 1} \right)^2 dt \\ & + 2 \left\{ \int_{\xi_0}^{\xi} \left(\int_0^{\infty} \frac{(\alpha + t - \xi_0)^{-1/2} d\alpha}{\exp(\alpha - \xi_0) + 1} \right. \right. \\ & \left. \left. \times \int_0^{t-\xi_0} \frac{\beta^{-1/2} d\beta}{\exp(\beta - t) + 1} \right) dt \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

其中 q_A 为 A 轨道的电子占据数; j_A 为总角动量; G_A 为束缚态波函数; $I_{1/2}$ 为 Fermi 积分; 其余各量为

$$\begin{aligned} \xi &= \xi(r) = \frac{V(r) + \mu}{T}; \\ \xi_0 &= \frac{V(R_0) + \mu}{T}; \\ \Gamma_{j_A} \nu_{j_B} &= 2 \begin{pmatrix} j_A & \nu & j_B \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}^2. \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y_{\nu}(A, B; ir) &= \frac{1}{r^{\nu}} \int_0^r t^{\nu} G_A(t) G_B(t) dt \\ &+ r^{\nu+1} \int_r^{R_0} \frac{1}{t^{\nu+1}} G_A(t) G_B(t) dt. \quad (10) \end{aligned}$$

电子的总数密度为

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \frac{1}{4\pi r^2} \sum_A q_A G_A^2(r) \\ &+ \frac{\sqrt{2} T^{3/2}}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{(y + (V(r) - V(R_0))T)^{1/2} dy}{\exp(y - \xi_0) + 1}. \quad (11) \end{aligned}$$

在 (11) 式中的第二项采用完全的统计方法计算自由电子密度分布,相当于 (7) 式中的 $\rho_l(r)$. 将 (8) 式对 $\rho(r)$ 进行变分就获得交换势

$$V_{ex}[\rho(r)] = -\frac{\partial \varphi_x[\rho(r)]}{\partial \rho} = -\frac{\partial \varphi_x(r)}{\partial r} \bigg/ \frac{\partial \rho(r)}{\partial r}, \quad (12)$$

其中

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_x(r)}{\partial r} &= -\frac{1}{8\pi} \sum_A \sum_B q_A q_B \sum_{\nu} \frac{1}{2} \Gamma_{j_A} \nu_{j_B} \\ &\times \frac{\partial}{\partial r} \left(G_A(r) G_B(r) Y_{\nu}(A, B; ir) \frac{1}{r^3} \right) \\ &- \frac{T^2}{2\pi^3} \frac{d\xi(r)}{dr} \left\{ \left(\int_0^{\infty} \frac{(\alpha + \xi - \xi_0)^{-1/2} d\alpha}{\exp(\alpha - \xi_0) + 1} \right)^2 \right. \\ &+ 2 \left(\int_0^{\infty} \frac{(\alpha + t - \xi_0)^{-1/2} d\alpha}{\exp(\alpha - \xi_0) + 1} \right. \\ &\left. \left. \times \int_0^{t-\xi_0} \frac{\beta^{-1/2} d\beta}{\exp(\beta - t) + 1} \right) \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_{\nu}(A, B; ir)}{\partial r} &= -\frac{\nu}{r^{\nu+1}} \int_0^r t^{\nu} G_A(t) G_B(t) dt + (\nu + 1) r^{\nu} \\ &\times \int_r^{R_0} t^{-(\nu+1)} G_A(t) G_B(t) dt. \quad (14) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho(r)}{\partial r} = \frac{2}{4\pi r^2} \left(\sum_A q_A G_A(r) G_A'(r) \right)$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{r} \sum_A q_A G_A^2(r) + \frac{\sqrt{T}}{\sqrt{2\pi^2}} \\
 & \times \int_0^\infty \frac{(y + (V(r) - V(R_0))/T)^{1/2} dy}{\exp(y - \xi_0) + 1} \frac{dV(r)}{dr}.
 \end{aligned} \quad (15)$$

这样获得的交换势中自动含有温度效应. 当温度很高时, 几乎没有束缚电子, 电子数密度主要来自自由电子, 交换势自动退化为含温 Maxwell 形式的交换势

$$\begin{aligned}
 V_{\text{ex}}(r) &= \frac{T^{1/2}}{\sqrt{2\pi^2}} \int_0^\infty \frac{(y + (V(r) - V(R_0))/T)^{1/2} dy}{\exp(y - \xi_0) + 1} \\
 &\approx \frac{\pi \alpha(r)}{T} \left(1 + \frac{6\alpha(r)}{T^{3/2}} + \frac{\pi^4 \rho^2(r)}{3T^3} \right)^{-1/3} \\
 &\approx \frac{\pi \alpha(r)}{T}.
 \end{aligned} \quad (16)$$

当温度很低, 压缩程度很高壳层被破坏殆尽时, 交换势自动退化为 Kohn-Sham 势

$$\begin{aligned}
 V_{\text{ex}}(r) &\approx \frac{\pi \alpha(r)}{T} \left(1 + \frac{6\alpha(r)}{T^{3/2}} + \frac{\pi^4 \rho^2(r)}{3T^3} \right)^{-1/3} \\
 &\approx \left(\frac{3}{\pi} \alpha(r) \right)^{1/3}.
 \end{aligned} \quad (17)$$

随着温度的降低, 多数物质将由等离子体态回到固体状态, 在物理上表现为常温常密度下物质的综合压强为一个大气压或为零. 鉴于现在研究的对象为低温等离子体, 温度虽不太高但远远高于实验室的情况, 可暂时忽略对离子压强或晶格压强的贡献, 认为在常温常密度下电子动压约等于交换负压的绝对值. 由于固态物质结构的复杂性, 再好的交换势普遍形式也只能计算主要部分, 残余的相互作用只能用参数的办法加以修正. 类似原子结构计算的 X_a 方法, 原子结构中使用的原子势为 $V(r) = V_c(r) + \alpha V_{\text{ex}}(r)$, 对应的电子压强为 $P = P_k + P_r + \alpha P_{\text{ex}}$, 其中

$$\begin{aligned}
 P_k &= \frac{2}{3\pi^2} \\
 &\times \int_{\epsilon_i}^{\epsilon_0} \frac{(\epsilon + V(R_0)) \sqrt{\mathcal{X}(\epsilon + V(R_0)) - l(l+1)R_0^2}}{\exp((\epsilon - \mu)T) + 1} d\epsilon,
 \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned}
 P_r &= \frac{1}{6\pi R_0^2} \sum_{l=0}^{l_0} \mathcal{X}(2l+1) \\
 &\times \int_{\epsilon_i}^{\epsilon_0} \frac{(\epsilon + V(R_0)) - l(l+1)2R_0^2}{\exp((\epsilon - \mu)T) + 1} G_{\alpha}^2(R_0) d\epsilon,
 \end{aligned} \quad (19)$$

其中, $G_{\alpha}(r)$ 是按能量归一化的波函数. 在常态下电子压强为零, 通过为数不多的迭代就可确定 α . 一旦 α 确定, 就等于校准了该材料的原子结构, 就可在带温度密度的计算中使用.

3. 计算结果和讨论

等离子体状态方程的确定比较依赖原子结构计算. 本部分以铁在温度为 100eV、物质密度为 7.85g/cm³ 下的原子结构为计算点, 计算了分波界限分别为 $l_0 = 0, 1, 2, 4, 8, 12$ 的情形, 考察了方法的收敛性, 分析了各个部分的贡献. 图 3 给出了纯粹束缚电子的径向分布. 本模型由于使用了新的自由电子判据, 把一些实质上是自由电子的部分扣了出去, 得到的束缚电子分布曲线在原子半径处几乎衰减为零, 即这样处理后的束缚电子不再对电子压强有直接贡献. 而简单平均原子模型给出的结果在原子边界处依然有电子存在, 说明束缚电子对电子压强有直接贡献, 只是在计算中忽略掉了. 图 4 给出最高分波数分别取为 1, 2, 4, 8, 12 的全部自由电子. 为了保证这些电子完全按自由电子的规律运动, 电子的最低能量必须高于(6)式的限制值. 最大分波数越高, 该项的贡献就越大. 图 5 给出的是用统计方法计算的量子数高于最大分波数的全部自由电子的径向分布. 最大分波数越大, 该项的贡献就越小. 如果最大分波数足够大, 该项的贡献则为零. 为了节省计算时间, 完全没必要全部使用分波法计算自由电子. 图 6 给出了全部自由电子的径向分布, 就是图 4 和图 5 中对应相同 l 的曲线值相加. $l=0$ 意味着没有使用分波法. l 越大就是分波的成分越多. 可以看到: 当分波数超过 8 时, 曲线已基本趋于

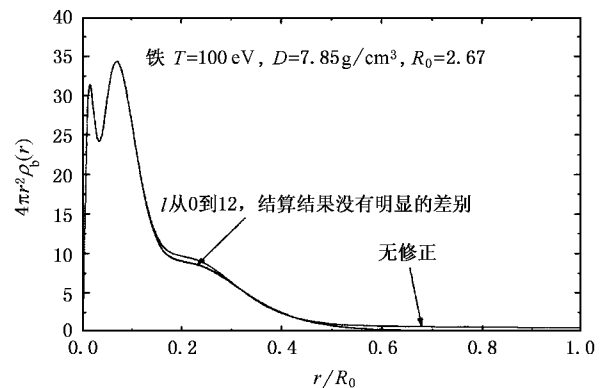


图 3 束缚电子的径向分布(与简单模型比较)

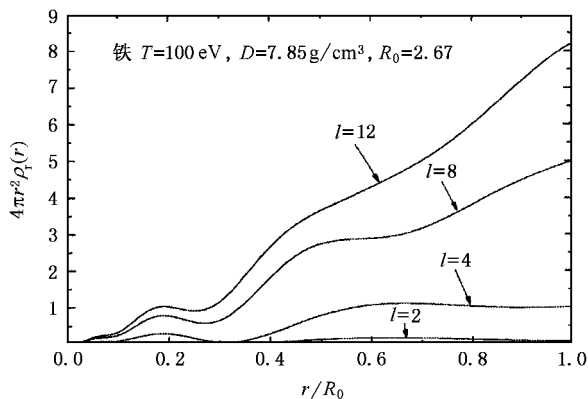


图 4 分波法计算的量子数低于 l 的全部自由电子径向分布

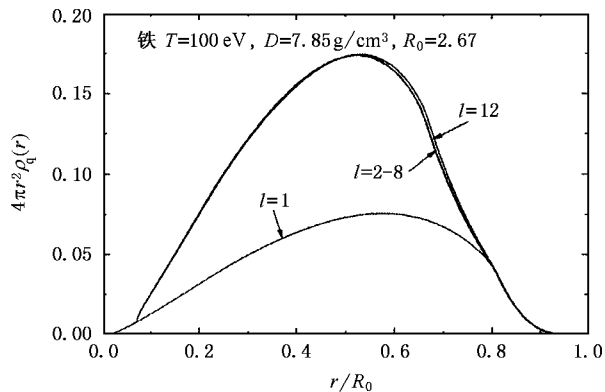


图 7 不完全自由的自由电子的径向分布(即(7)式中第二项的贡献)

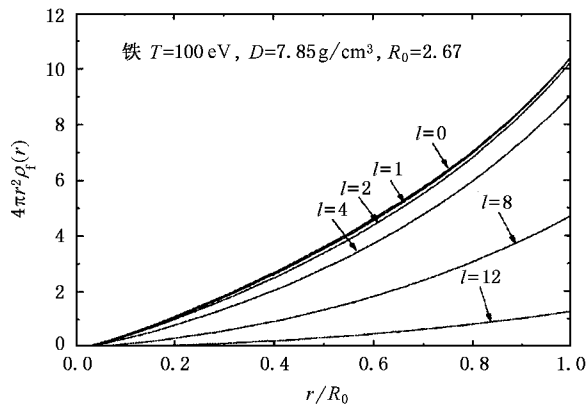


图 5 用统计方法计算的量子数高于 l 的全部自由电子的径向分布

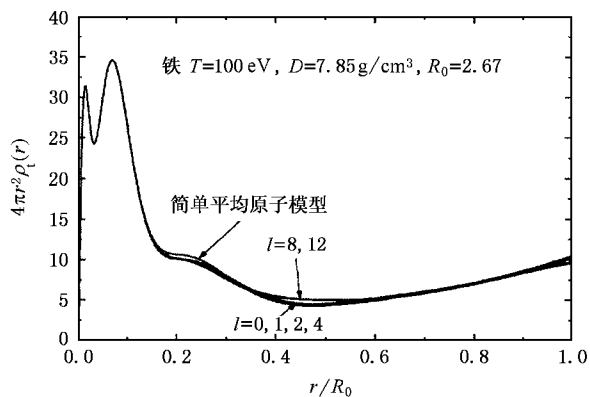


图 8 取不同的量子数 l 后得到的全部电子的径向分布(与简单平均原子模型比较)

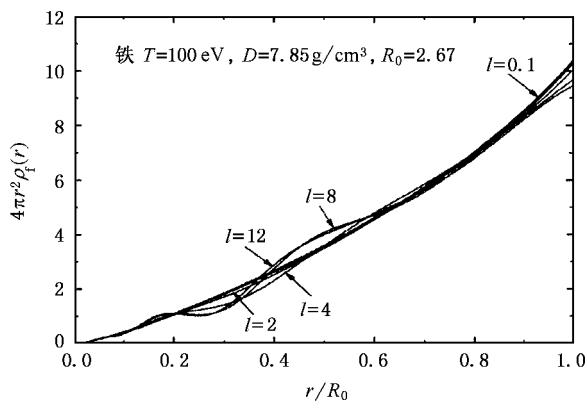


图 6 取不同量子数 l 后的全部自由电子径向分布(即图 4 与图 5 对应相同 l 的曲线相加)

稳定. 这说明,即使对于高温问题,分波数也没必要取得很多,但必须有一定数量的分波.从图 6 还可看到,随着最大分波数的增加,自由电子在原子边界处的值逐渐下降.这意味着电子压强要下降了,这

是一个好的趋势,因为简单平均原子给出的电子压强总是偏高.图 7 给出的是“不完全自由”的自由电子的径向分布,即(7)式中右边第二项的贡献,在所有的简单平均原子模型中都没有该项.因为在一般情况下自由电子被认为可以运动到无穷远的位置,不管轨道角动量 l 有多大,只要远离原子核心,穿透原子边界附近的势垒后,就成为真正的自由电子,该分波一定能存在.但现在情况不同了,被压缩的原子中的电子没有足够的空间以便穿透势垒,或即使穿透了势垒也会进入下一个原子的势垒中.最后某个 l 轨道的电子就会停留在原子和原子边界之间的势阱里,即该电子从能量判据看是自由的,但它无法运动到原子边界处.当然该类型的电子对电子压强无直接贡献.从图 7 看到,即使在高温情况下,该项随轨道量子数的收敛很快, l 从 2 到 12 的变化甚微,但 l 等于 0, 1, 2 的差异极大,一般不可忽略.该部分电子占据了自由电子的份额却不直接提供电子

压强,实际上降低了简单平均原子模型的电子压强值.图8给出不同分波判据下的全部电子分布比较(含与简单平均原子模型比较).即使在高温情况下,对简单平均原子模型还是有修正的,只是差异不太大,从而保证高温的结果不会有太大的变化.但对低温情况就不同了,原子中只有几个低分波,但几个分波就会带来非常大的差异.

表1给出了铁元素在100eV, 7.85 g/cm^3 时各能带的上下限、势阱深度 $-V(R_0)$ 、化学势 μ 、束缚电子数 Z_b 、不自由的分波电子数 Z_q 、自由的分波电子数 Z_r 、统计的自由电子数 Z_f 、电子压强 P 、电子统计动压 P_k 、电子分波动压 P_r 、电子交换负压 P_{ex} 随轨道判据的比较.可以看到,该温度密度条件下, $3p_{3/2}$ 以里的壳层几乎不存在能带问题,以外的壳层能带效应逐渐明显.一般看来,主量子数为4的壳层的能带是部分离化的.但是,由于等离子体内的均匀势阱深度已经深入到 $4p_{1/2}$,实际上该两个壳层的电子是全部离化的.但它们如果要脱离等离子体边缘,还要克服平均势阱的约束.它们所产生的电子压强将为电子间的交换负压所削弱.从原子内部的

电子数划分来看,束缚电子数 Z_b 不会直接产生电子压强;不自由的分波电子数 Z_q 由于电子不能到达原子边界也不会直接产生电子压强,能够直接产生电子压强的只有自由的分波电子数 Z_r 和统计的自由电子数 Z_f .从表中看到,随着分波法的应用,直接产生电子压强的电子数下降了0.24.这种下降在高温情况下微不足道,但在低温下就有显著的作用.在常温常密度下为了使电子压强与交换负压平衡,就必须考虑这种修正.从电子压强的份额看,在高温情况下引进一两支分波意义不大,当分波数达到12以后基本收敛.随着 l 的增加, P_k 的角色逐渐由 P_r 承担.两者相加后,电子总压强下降,而交换负压基本上没有显著的改变.分波达到饱和后,电子压强下降40%左右.图9给出含温Slater交换势与本文交换势的比较.两者的高温渐进形式全部为Maxwellian形式.从图中看到,当电子密度很高时,电子近乎简并,所以与Slater交换势的比值接近2/3;当电子密度较低时,简并完全解除,相当于温度很高的情况,这时两种交换势趋于一致.

图10给出铁元素分别在100eV和300K的电子

表1 不同轨道量子数判据下原子结构参数的比较(铁: $T=100\text{eV}$, $D=7.85\text{g/cm}^3$)

轨道	l=0		l=1		l=2		l=4		l=8		l=12	
	$\epsilon_l/a.u.$	$\epsilon_u/a.u.$	$\epsilon_l/a.u.$	$\epsilon_u/a.u.$	$\epsilon_l/a.u.$	$\epsilon_u/a.u.$	$\epsilon_l/a.u.$	$\epsilon_u/a.u.$	$\epsilon_l/a.u.$	$\epsilon_u/a.u.$	$\epsilon_l/a.u.$	$\epsilon_u/a.u.$
$1s_{1/2}$	-265.37	-265.37	-265.36	-265.36	-265.34	-265.34	-265.36	-265.36	-265.32	-265.32	-265.28	-265.28
$2s_{1/2}$	-35.313	-35.313	-35.304	-35.304	-35.288	-35.288	-35.315	-35.315	-35.268	-35.268	-35.236	-35.236
$2p_{1/2}$	-31.408	-31.400	-31.400	-31.400	-31.384	-31.384	-31.409	-31.409	-31.363	-31.363	-31.330	-31.330
$2p_{3/2}$	-30.922	-30.922	-30.914	-30.914	-30.898	-30.898	-30.923	-30.913	-30.877	-30.877	-30.844	-30.844
$3s_{1/2}$	-6.0771	-6.0771	-6.0709	-6.0708	-6.0582	-6.0581	-6.0848	-6.0847	-6.0341	-6.0340	-6.0060	-6.0058
$3p_{1/2}$	-4.8370	-4.8367	-4.8309	-4.8306	-4.8181	-4.8178	-4.8448	-4.8445	-4.7949	-4.7945	-4.7667	-4.7664
$3p_{3/2}$	-4.7525	-4.7521	-4.7463	-4.7460	-4.7336	-4.7332	-4.7600	-4.7597	-4.7100	-4.7097	-4.6821	-4.6818
$3d_{3/2}$	-2.7753	-2.7741	-2.7689	-2.7677	-2.7560	-2.7549	-2.7836	-2.7825	-2.7350	-2.7338	-2.7066	-2.7054
$3d_{5/2}$	-2.7609	-2.7597	-2.7545	-2.7533	-2.7416	-2.7405	-2.7692	-2.7681	-2.7206	-2.7194	-2.6923	-2.6911
$4s_{1/2}$	-0.4125	+0.0252	-0.4106	+0.0281	-0.4053	+0.0353	-0.4089	+0.0276	-0.3902	+0.0547	-0.3805	+0.0689
$4p_{1/2}$	-0.0679	+0.4761	-0.0661	+0.4789	-0.0613	+0.4860	-0.0641	+0.4787	-0.0472	+0.5050	-0.0385	+0.5188
$4p_{3/2}$	-0.0556	+0.5007	-0.0538	+0.5035	-0.0491	+0.5106	-0.0518	+0.5034	-0.0351	+0.5296	-0.0265	+0.5433
$-V(R_0)$	-0.09752(a.u.)		-0.09736(a.u.)		-0.096386(a.u.)		-0.094338(a.u.)		-0.091009(a.u.)		-0.088993(a.u.)	
μ	-7.43062(a.u.)		-7.41744(a.u.)		-7.39791(a.u.)		-7.41150(a.u.)		-7.36756(a.u.)		-7.33443(a.u.)	
Z_b	15.143		15.149		15.152		15.170		15.154		15.154	
Z_q	0.0000		0.111447		0.23152		0.23136		0.22993		0.23000	
Z_r	0.0000		0.00814		0.19980		1.6413		6.1599		9.4460	
Z_f	10.857		10.732		10.416		8.9558		4.4564		1.1704	
P	0.4348012(a.u.)		0.4307715(a.u.)		0.4211576(a.u.)		0.3775026(a.u.)		0.2732032(a.u.)		0.2313547(a.u.)	
P_k	0.4367070(a.u.)		0.4326709(a.u.)		0.4229593(a.u.)		0.3757376(a.u.)		0.2151176(a.u.)		0.0679970(a.u.)	
P_r	0.000000(a.u.)		0.0000001(a.u.)		0.0000587(a.u.)		0.0035459(a.u.)		0.0597622(a.u.)		0.1650070(a.u.)	
P_{ex}	-0.001906(a.u.)		-0.001899(a.u.)		-0.001861(a.u.)		-0.001781(a.u.)		-0.001677(a.u.)		-0.001649(a.u.)	

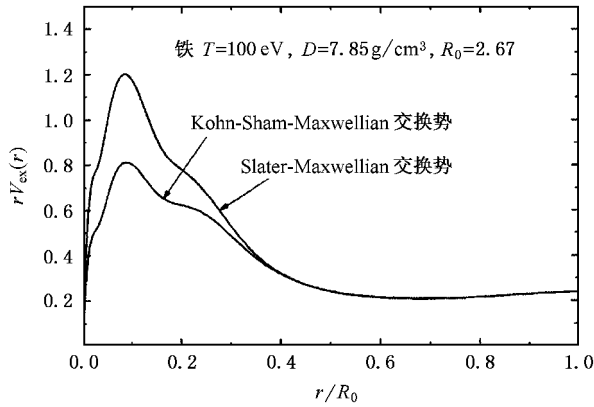


图 9 铁的两种含温交换势的比较

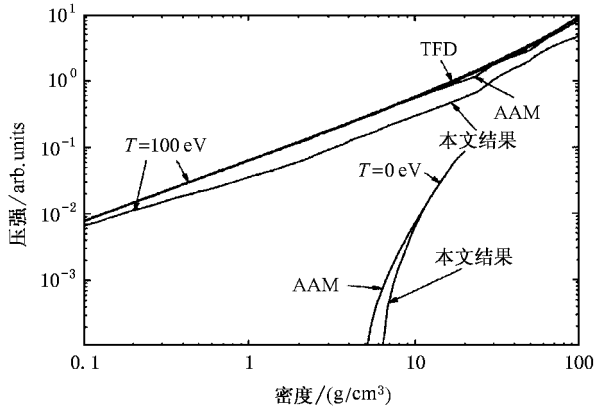


图 10 铁元素在 100eV 和 300K 下的电子压强比较

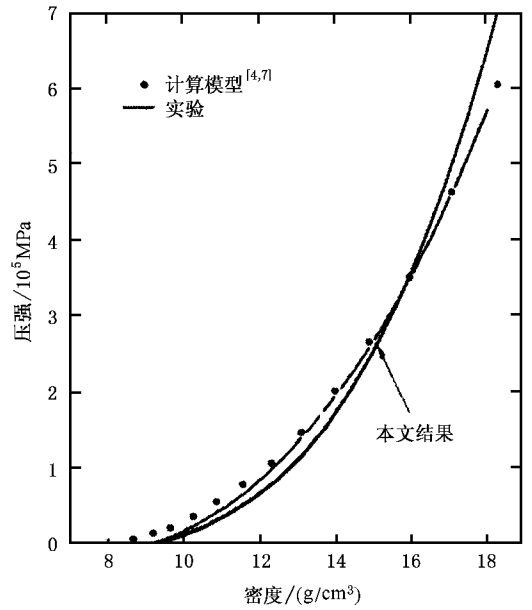


图 12 零温铜电子压强与其他理论及实验的比较

压强比较图. 在图中,TF 模型与 TFD 模型结果已经无法区分. 简单平均原子模型的结果与 TFD 模型差别甚微. 但是采用分波法后,电子压强下降非常明显,体现了分波法电子压强机理与 FD 统计的差异,这种差异在表 1 中可以看到. 图 10 中的零温曲线是用温度为 300K 的曲线模拟的. 在低温情况下等离子体内不存在较多的分波,且密度越高分波越少,分波修正主要发生在低密度. 简单平均原子模型给出的铁的“常密度”为 5.2g/cm^3 ,经过分波修正和电子动压、交换压修正后给出的“常密度”为 6.3g/cm^3 左右. 虽然离铁的真正常密度 7.85g/cm^3 还有百分之十几的误差,但本模型从极高温连续降到室温,与真实情况符合到这种程度,说明改进是有效的. 尽管模型在交换势中使用了极其复杂的形式,得到相当好的规律,但依旧会有些集体效应残余遗漏. 为了克服这一缺陷,本文引进了 X_a 的概念. 在理想情况下 $\alpha = 1.0$. 图 11 是零温镍电子压强与 Liberman 的理论计算以及与实验的比较^[4,7],附加了简单平均原子模型的结果. 图中的 α 值取 1.12. 简单平均原子模型的结果的偏差呈倍数关系. 本模型经过 α 修正后,在密度为 $9\text{—}14\text{g/cm}^3$ 的范围与 Liberman 的结果符合;在密度为 $14\text{—}17\text{g/cm}^3$ 的范围与实验结果符合. 图 12 给出零温铜元素电子压强与 Liberman 的理论计算以及与实验的比较^[4,7], α 值取 0.83,与镍的情况类似. 从图 11,12 也看到,在密度较高

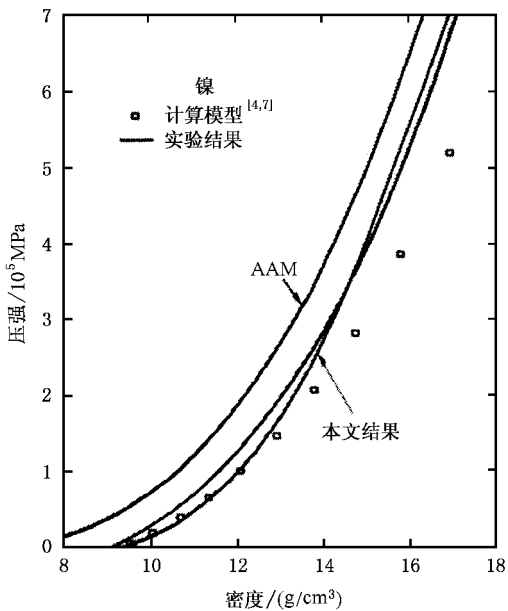


图 11 零温镍电子压强与其他理论及实验的比较

的地方,本模型给出的电子压强比实验高。这是由于分波使用的是自由边界,没有考虑周期性条件所致的边界值过大带来的影响。这个问题比较复杂,我们将在更新的模型中加以考虑。

4. 结 论

通过对平均原子自洽场模型的修改,引进等效势阱和能带,动态改变自由电子判据,考虑了准自由

电子的贡献。通过将自由电子区分为三部分,引进不同的压强机理降低了电子压强。通过选择混合形式的交换势,使计算结果在规律上接近实验。经过常密度点的标定自洽地调整交换效应的贡献,使大范围的电子压强与实验符合。本模型比较适合很大温度密度范围的等离子体电子压强的计算。

本文作者在研究过程中与刘海风副研究员和胡晓棉研究员作了十分有益的讨论,在此特表示感谢。

- [1] Xu X S and Zhang W X 1986 *An Introduction to Practical Theory of Equation-of-State* (Beijing Science Press) p138—231 (in Chinese)
[徐锡申、张万箱 1986 实用物态方程理论导引(北京 科学出版社 第 138—231 页)]
- [2] Zink J W 1968 *Phys. Rev.* **176** 279
- [3] Rozsnyai B F 1972 *Phys. Rev. A* **5** 1137

- [4] Liberman D A 1979 *Phys. Rev. B* **20** 4981
- [5] Liberman D A 1994 *Phys. Rev. A* **500** 171
- [6] meng X J and Sun Y S 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 345 (in Chinese)
[孟续军、孙永盛 等 1994 物理学报 **43** 345]
- [7] Liberman D A 1994 *JQSRT* **51** 197

An average-atom model with potential-well and mixed form of exchange potential^{*}

Jia Hong-Xiang[†] Meng Xu-Jun

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

(Received 5 March 2004 ; revised manuscript received 9 June 2004)

Abstract

A traditional average-atom model (AAM) is improved in several aspects. 1. A dynamic criterion for free electrons is adopted. 2. The free electrons are classified in three types, each of which is treated by the partial wave method and Fermi-Dirac statistics. 3. An exchange potential in mixed type is obtained to replace the Slater potential by applying the variation principle. 4. A parameter α in the atomic structure is calibrated by the constants of material under normal conditions. As examples electron pressures of Iron, Nickel and Copper at zero temperature are calculated and compared with the results obtained by other theories and in experiments.

Keywords : average-atom model, exchange potential, electron pressure

PACC : 3120, 3120G, 5225K

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10174010), the Foundation of National Key Laboratory of Science and Technology for Shock Wave and Detonation Physics (Grant No. 51478030203ZW0902).

[†] E-mail : jia_hongxiang@iapcm.ac.cn ; Tel 010-62014411-2393.