ЛИТЕРАТУРА

[1] Крылов В. В.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1990. **31**, № 6. С. 63. [2] Олинер А.//Поверхностные акустические волны. М., 1981. С. 226. [3] Moss S. L., Maradudin A. A., Cunningham S. L.//Phys. Rev. 1973. **B** 8, N 6. P. 2999. [4] Tiersten H. F., Rubin D.//IEEE Ultrason. Symp. Proc. Milwaukee (Wisconsin), 1974. P. 117. [5] Krylov V. V.//Proc. Ext. Abstr. 2nd Intern. Symp. «Surface Waves in Solids and Layered Structures». Varna (Bulg.), 1989. V. 1. P. 63. [6] Крылов В. В.//Акуст. журн. 1989. **35**, № 2. С. 294. [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М., 1987. [8] Завадский В. Ю. Вычисление волновых полей в открытых областях и волноводах. М., 1972. [9] Dutta K. L., Chakraborty S. K.//Indian J. Pure Appl. Math. 1989. **20**, N 6. P. 646.

Поступила в редакцию
16.05.90

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1991. Т. 32, № 1

ГЕОФИЗИКА

УДК 530.145:550.383

ОЦЕНКИ БАРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ТОМАСА—ФЕРМИ—ДИРАКА

А. В. Калев

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Теоретические исследования поляризации при наличии неоднородных давлений в химически однородном изотермическом веществе проводятся на основе модели Томаса—Ферми—Дирака. Получены оценки электрических и магнитных полей Земли, возникающих при гравитационном сжатии и вращении.

Факт возникновения электростатического поля внутри проводника под действием гравитационных сил экспериментально установлен более двадцати лет назад [1, 2]. В результате теоретических исследований в этой области был разработан ряд подходов к описанию данного явления (см., напр., [3—5]). Применение различных моделей и существенная неоднозначность в оценках гравитационной поляризации указывают на то, что появление электрического поля вызвано, вероятно, несколькими физическими причинами.

Основной причиной перераспределения зарядов в экспериментах [1, 2] с химически однородными проводниками при постоянной температуре является, по-видимому, бароэлектрический эффект [6], сущность которого заключается в следующем. Наличие в проводнике неоднородных давлений, вызванных гравитационным сжатием вещества, обусловливает неравномерное распределение энергии, а следовательно, и химического потенциала электронов в среде. По этой причине должны происходить переходы электронов из областей с большими в области с меньшими давлениями до тех пор, пока электрохимический потенциал не станет постоянным во всех точках вещества.

В основе настоящей работы лежит условие постоянства электрохимического потенциала [6], которое эквивалентно выполнению соотношения

$$\operatorname{grad}\left\{W+\frac{E^2}{8\pi}\right\}=0, \tag{1}$$

где W — плотность «избыточной» энергии (по сравнению с энергией при нулевом давлении), усредненная по физически бесконечно малым объемам, $\mathbf{E}$ — усредненная по бесконечно малым физическим объемам напряженность электрического поля, возникающего в неоднородно-напряженном веществе.

Пользуясь условием (1), можно оценивать поля, возникающие благодаря бароэлектрическому эффекту, если известно, как изменяется W с изменением давления p. Для выяснения зависимости $W(p)$ был применен ряд подходов. В работе [6] эта задача решалась в рамках феноменологического метода. Позже было предложено микроскопическое рассмотрение [7], основанное на модели Хартри—Слэтера. Преимущество микроскопического описания очевидно, поскольку такой подход позволяет обходиться без использования феноменологических параметров.

Оценки бароэлектрического эффекта проводились также на основе статистической модели Томаса—Ферми [8]. Модель Томаса—Ферми имеет ряд преимуществ по сравнению с методами Хартри—Слэтера, так как позволяет проводить вычисления для ненулевых температур, а также исследовать химически неоднородные вещества. Кроме того, она дает возможность относительно просто осуществлять численные оценки.

В настоящей работе для оценок используется модель Томаса—Ферми—Дирака, которая учитывает обменное взаимодействие электронов [9]. Сохраняя все преимущества модели Томаса—Ферми, она позволяет устранить недостатки этой модели и тех ее модификаций, которые не учитывают обмен, существенно влияющий на зависимость $W(p)$ [8]. Теоретические значения размеров атомов при нулевом давлении, получаемые на основе модели Томаса—Ферми—Дирака, оказываются близкими к экспериментальным. Становится возможным исследование области отрицательных давлений.

Будем рассматривать среду как совокупность сферически симметричных атомных ячеек, каждая из которых состоит из ядра с зарядом Ze, где e — абсолютная величина заряда электрона, и «газа» из N электронов при температуре абсолютного нуля. Исследование области ненулевых температур должно стать предметом отдельной публикации, однако следует заметить, что для температур, далеких от температуры Ферми, оценки эффектов будут близкими к тем, которые получены ниже.

Полная энергия ячейки записывается в виде

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{kin}} + \mathcal{E}_{\text{pot}} + \mathcal{E}_{\text{ex}},$$

где $\mathcal{E}_{\text{kin}} = \varkappa_{\text{kin}} \int dv n(r)^{5/3}$ — кинетическая энергия, $\varkappa_{\text{kin}} = (3/10)\,(3\pi^2)^{2/3} e^2 a_0$, $n(r)$ — плотность электронов в ячейке на расстоянии r от ядра, a_0 — боровский радиус. Интегрирование здесь и далее проводится по объему ячейки. Электростатическая энергия $\mathcal{E}_{\text{pot}}$ состоит из энергии взаимодействия электронов друг с другом и энергии взаимодействия электронов с ядром:

$$\mathcal{E}_{\text{pot}} = -\frac{e^2}{2} \int dv dv' \frac{n(r)\, n(r')}{|r - r'|} - Ze^2 \int dv \frac{n(r)}{r}.$$

Обменная энергия ячейки с учетом вырождения электронного газа имеет вид

$$\mathcal{E}_{\text{ex}} = \varkappa_{\text{ex}} \int dv n^{4/3},$$

где $\varkappa_{ex} = (3/4)(3/\pi)^{1/3}e^2$. Варьирование $\mathscr{E}$ относительно n при неизменных внешних условиях и постоянном числе электронов в атомной ячейке приводит к уравнению Томаса—Ферми—Дирака. Вводя множитель Лагранжа eU_0, имеющий смысл электрохимического потенциала с обратным знаком, можно сформулировать вариационный принцип в виде

$$\delta(\mathscr{E} + eU_0N) = 0.$$

Тогда связь плотности электронов в ячейке и потенциала U атома будет выглядеть следующим образом:

$$n = \sigma(\sqrt{U - U_0 + \tau^2} + \tau)^3, \tag{2}$$

где

$$\sigma = \left(\frac{3e}{5\varkappa_{kin}}\right)^{3/2}, \quad \tau = \left(\frac{1}{2\pi^2}\frac{e}{a_0}\right)^{1/2}.$$

Используя уравнение Пуассона, можно исключить из рассмотрения плотность электронов и с учетом (2) получить нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка для потенциала:

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rU) = 4\pi\sigma e((U - U_0 + \tau^2)^{1/2} + \tau)^3. \tag{3}$$

Граничные условия можно записать, воспользовавшись тем, что суммарный потенциал вблизи ядра становится кулоновским (Ze/r) и полный заряд электронов в ячейке есть

$$4\pi\int dr r^2(-e)\,n = (-e)\,N.$$

Тогда для потенциала имеем

$$\lim_{r\to 0}(rU) = Ze,$$

$$\left.\frac{dU}{dr}\right|_{r=R} = -q\frac{Ze}{R^2}, \tag{4}$$

где R — радиус ячейки, $q = (Z - N)/Z$ — степень ионизации атома. В дальнейшем будем рассматривать нейтральные атомы, т. е. будем считать, что $N = Z$. В этом случае граничное условие (4) кроме электронейтральности атома требует непрерывности потенциала и плотности электронов при переходе от одной ячейки к другой и тем самым учитывает периодическую структуру плотности заряда в системе атомных ячеек.

Решение уравнения (3) с граничными условиями (4) требует привлечения вычислительной техники. Потенциал электронов в ячейке был найден численным интегрированием при заданных величинах R и Z.

Точность нахождения значений энергии для различных радиусов R ячейки должна быть относительно высокой: $\Delta\mathscr{E}/\mathscr{E} \sim 10^{-4}\%$ [8], что сильно затрудняет вычисления по интегральным формулам для энергии. Удобнее воспользоваться связью энергии и давления в ячейке:

$$p = -\frac{1}{4\pi R^2}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial R},$$

которая приводит к простому выражению для давления:

$$p = \frac{2}{3}\varkappa_{kin}n^{5/3}\left(1 - \left(\frac{\varkappa_{ex}}{2\varkappa_{kin}}\right)n^{-1/3}\right)_{r=R}.$$

Интегрирование по R позволяет численно найти связь p и плотности «избыточной» энергии ячейки

$$W = \frac{3(\mathscr{E}(R) - \mathscr{E}(R_0))}{4\pi R^3},$$

где $\mathscr{E}(R)$ — энергия ячейки радиуса R, R_0 — радиус ячейки при нулевом давлении. Полученная зависимость $W(p)$ для Al и Pb представлена на рис. 1.

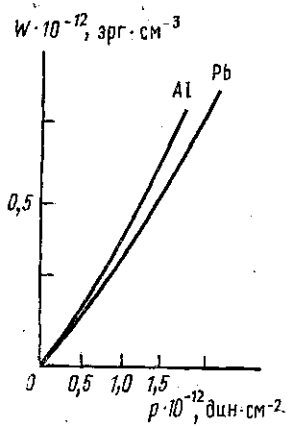

Рис. 1

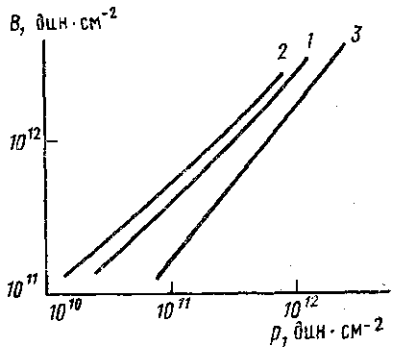

Рис. 2

При относительно небольших деформациях, когда справедлив закон Гука, $W(p)$ можно аппроксимировать квадратичной зависимостью $W = p^2/2B$, где постоянная величина B — модуль всестороннего сжатия среды. Однако получаемое значение B сильно отличается от экспериментально наблюдаемых величин, так как в модели не принимались во внимание оболоченные эффекты. Сжимаемость при невысоких давлениях зависит в первую очередь от межатомных сил взаимодействия, которые определяются электронной структурой внешних областей атома. В связи с этим результаты вычислений для $W(p)$ при малых деформациях получаются примерно на порядок завышенными по сравнению с расчетами по методу Хартри — Слэтера, который учитывает оболоченные эффекты.

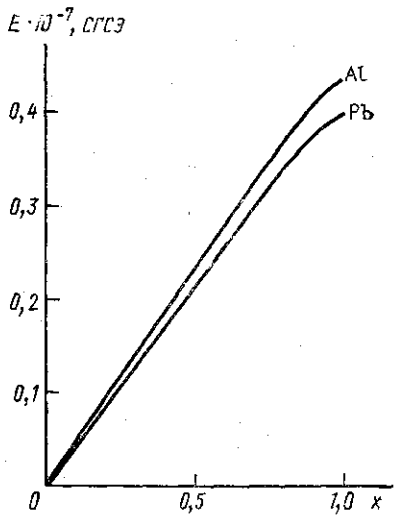

Рис. 3

При высоких давлениях, когда свойства электронной структуры становятся менее существенными, поведение сжимаемости различных элементов становится более сходным. Для сравнения на рис. 2 в логарифмическом масштабе представлены графики зависимости сжимаемости $B = -(R/3)\partial p/\partial R$ от давления по модели Томаса—Ферми—Дирака для Al и Pb (кривые *1* и *2* соответственно) и по модели свободных электронов (прямая *3*: $B = (5/3)p$).

Для оценки бароэлектрического эффекта представляет интерес задача о «планете» — шаре химически однородного состава с радиусом r_0 и постоянной плотностью τ_0. Из условия механического равновесия следует, что распределение давлений в такой «планете» имеет вид

$$p = \frac{2\pi}{3} G(\tau_0 r_0)^2 (1 - x^2),$$

где $x = r/r_0$, r — расстояние от центра «планеты», G — гравитационная постоянная. Бароэлектрический эффект вызывает переходы электронов из внутренних областей в приповерхностные. В силу сферической симметрии задачи отлична от нуля только радиальная компонента напряженности электрического поля $E(x)$, поэтому с учетом того, что $E(0) = 0$, из условия (1) имеем

$$E(x) = 8\pi (W_0 - W(x))^{1/2}, \tag{5}$$

где $W_0 = W(0)$.

График зависимости $E(x)$ для «планет» из Al и Pb с параметрами τ_0 и r_0, равными соответственно средней плотности и радиусу Земли, представлен на рис. 3. Физически наиболее важным является поведение поля вблизи поверхности. Величина напряженности электрического поля в приповерхностных слоях получается очень большой: $E(1) \sim 4 \times 10^6$ СГСЭ. Такой же порядок имеют оценки поля, получаемые на основе других методов. Из анализа (5) видно, что на величину $E(1)$ влияет поведение $W(p)$ в области давлений $p \sim (2\pi/3) G(\tau_0 r_0)^2$. Поскольку модель Томаса—Ферми—Дирака хорошо описывает области высоких давлений, ее применение в задаче является оправданным.

Бароэлектрический эффект приводит к перераспределению зарядов между ячейками, поэтому электронейтральность их нарушается и правая часть во втором граничном условии (4) становится отличной от нуля. Величину отличия можно оценить из уравнения Максвелла, которое позволяет найти плотность объемного заряда ρ_v. Для задачи о «планете» имеем

$$\rho_v = \frac{1}{4\pi r^2} \frac{d}{dr} (r^2 E)$$

и из (6) получаем, что степень ионизации $q \leqslant 10^{-14}$, т. е. вклады эффектов, обусловленных нарушением электронейтральности, пренебрежимо малы.

Поверхностная плотность зарядов на границе шара определяется из условия отсутствия электрического поля при $r > r_0$, что эквивалентно электронейтральности «планеты» в целом:

$$\rho_s = -\frac{1}{4\pi} E(r_0). \tag{7}$$

Перейдем теперь к оценкам магнитных полей, возникающих при вращении «планеты» с постоянной угловой скоростью $\boldsymbol{\omega}$. Для простоты будем считать, что магнитная проницаемость среды $\mu = 1$. Движение объемных и поверхностных зарядов приводит к возникновению замкнутых токов, вызывающих магнитное поле. Вне шара поле имеет чисто дипольный характер. Учет условий (6) и (7) позволяет найти дипольный магнитный момент «планеты» $\mathbf{M}$ по формуле

$$\mathbf{M} = -\frac{2\boldsymbol{\omega}}{3c} \int_0^{r_0} r^3 E dr,$$

где c — скорость света. Из уравнений Максвелла с использованием граничных условий для поля на поверхности «планеты» можно получить вид горизонтальной H_θ и вертикальной H_r компонент вектора напряженности магнитного поля при $r \leqslant r_0$:

$$H_\theta = \frac{\omega}{3c} \sin\theta \left(3rE - \frac{2}{r^3} \int_0^r r^3 E dr - 2 \int_r^{r_0} E dr \right),$$

$$H_r = \frac{2\omega}{3c} \cos\theta \left(\int_r^{r_0} E dr - \frac{2}{r^3} \int_0^r r^3 E dr \right),$$

где угол θ отсчитывается от направления $\boldsymbol{\omega}$. Рассмотрение проведено для инерциальной системы, в которой центр шара покоится. Однако, если не учитывать релятивистские эффекты, формулы будут справедливы и для системы координат, связанной с поверхностью «планеты». Кроме того, не принималась во внимание центробежная поляризация, что справедливо в случае, когда

$$\omega \ll 2 \left(\frac{\pi}{3} G\tau_0 \right)^{1/2}.$$

Исходя из формулы для $\mathbf{M}$, легко можно оценить усредненные магнитные поля, возникающие благодаря бароэлектрическому эффекту, у поверхности Земли. Теоретические оценки H для полярных и экваториальной областей дают 0,8 и 0,4 Э соответственно, в то время как экспериментальные значения составляют 0,6—0,75 Э и 0,35 Э.

Рассмотренная выше модель «планеты», разумеется, сильно упрощает характер распределения давлений в реальных астрофизических объектах. Различного рода неоднородности (в химическом строении, в распределении масс вещества, температуры) существенно сказываются на зависимости давления от координат и тем самым приводят к сложной пространственной картине электрических и магнитных полей. И хотя для оценок магнетизма в первую очередь следует учитывать магнитогидродинамические эффекты, от которых зависит, в частности, временное изменение магнитного поля (в том числе и его инверсия), бароэлектрический эффект вносит значительный вклад в магнитный момент планет и звезд.

В заключение автор выражает глубокую признательность В. И. Григорьеву за большую помощь в работе и полезные обсуждения результатов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Witteborn F. C., Fairbank W. M.//Phys. Rev. Lett. 1967. **19**. P. 1049. [2] Craig P. P.//Phys. Rev. Lett. 1969. **22**. P. 700. [3] Schiff L. I., Barnhill M. V.//Phys. Rev. 1966. **151**. P. 1067. [4] Dessler A. J. et al.//Phys. Rev. 1968. **168**. P. 737. [5] Kumar N., Nandini R.//Phys. Rev. 1973. 7. P. 3586. [6] Григорьев В. И., Григорьева Е. В.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1986. **27**, № 2. С. 3. [7] Григорьев В. И. и др.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1989. **30**, № 5. С. 45. [8] Калев А. В. Препринт НИИЯФ МГУ. 1989, № 89-23/100. [9] Гамбош П. Статистическая теория атома и ее применения. М., 1951.

Поступила в редакцию
08.02.90