ТО́МАСА — ФЕ́РМИ А́ТОМ — квазиклассич. статистич. модель атома, основанная на применении *Томаса — Ферми теории* к атому с большим числом электронов ($Z \gg 1$). Исходным является предположение о непрерывном сферически-симметричном распределении плотности заряда $\rho(\boldsymbol{r})$ в атоме. Энергия электрона записывается в виде

$$\mathscr{E}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) = \frac{p^2}{2m} + e\varphi(\boldsymbol{r}), \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{r}$ — радиус-вектор точки, e, m — заряд и масса электрона, $\boldsymbol{p}$ — его импульс, $\varphi(\boldsymbol{r})$ — электростатич. потенциал, определяемый *Пуассона уравнением*

$$\nabla^2\varphi(\boldsymbol{r}) = -4\pi\rho(\boldsymbol{r}). \qquad (2)$$

Электроны в атоме рассматриваются как ферми-газ с ферми-импульсом $\boldsymbol{p}_F(\boldsymbol{r})$, определяемым из условия $\mathscr{E}(\boldsymbol{p}_F, \boldsymbol{r}) = 0$ (электрон находится в связанном состоянии при $p \leqslant p_F$). Плотность электронного заряда $\rho(\boldsymbol{r})$ связана с p_F и, соответственно, с φ соотношением

$$-\rho = -\frac{8\pi e p_F}{3(2\pi\hbar)^3} = \frac{8\pi(-2me)^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3}\varphi^{3/2}. \qquad (3)$$

Подстановка (3) в (2) даёт ур-ние для φ:

$$-\frac{1}{r}\frac{d^2(r\varphi)}{dr^2} = -\frac{4e(-2me)^{3/2}}{3\pi\hbar^3}\varphi^{3/2} \qquad (4)$$

с граничными условиями

$$\varphi \to \frac{Z|e|}{r} \quad \text{при } r \to 0; \ \varphi \to 0 \quad \text{при } r \to \infty. \qquad (5)$$

При переходе к безразмерным переменным

$$\chi = \frac{r|\varphi|}{Z|e|}, \quad x = \left[\left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)^{1/3}\frac{\hbar^2}{me^2}\right]^{-1} r \qquad (6)$$

получается ур-ние

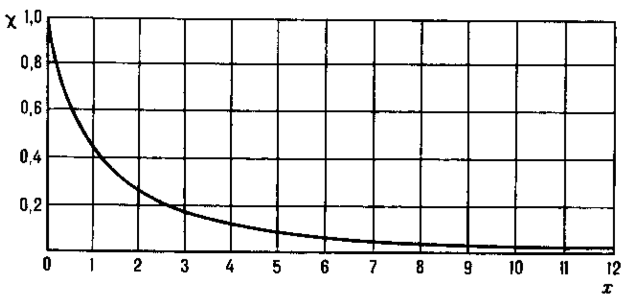
$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}} \qquad (7)$$

с граничными условиями

$$\chi \to 1 \text{ при } x \to 0, \ \chi \to 0 \text{ при } x \to \infty. \qquad (8)$$

Краевая задача (7), (8) решается численно. Результатом является универсальная табулированная ф-ция, к-рая монотонно убывает, обращаясь в нуль лишь на бесконечности (рис.).

Условия применимости квазиклассич. приближения, лежащего в основе Т.— Ф. а., нарушаются на малых расстояниях от ядра ($r \ll \hbar^2/e^2m$) и вдали от него ($r \gtrsim \hbar^2/Ze^2m$). У тяжёлых атомов в области использования модели находится б. ч. электронов. Модель Т.— Ф. а. не передаёт всех деталей распределения электронной плотности внутри атома, но позволяет достаточно точно установить общий характер этого распределения.



С помощью модели Т.— Ф. а. можно вычислить полную энергию ионизации атома, т. е. энергию, необходимую для удаления всех электронов из нейтрального атома. Эта энергия равна половине энергии электростатич. взаимодействия между электронами, распределение к-рых описывается ф-лой (3) и ур-нием (4).

Модель Т.— Ф. а. не учитывает *обменного взаимодействия* между электронами. Связанные с ним эффекты — следующего порядка малости по параметру $Z^{-2/3}$. Поэтому учёт обменного взаимодействия требует одновременного учёта др. эффектов такого порядка.

Ур-ние (7) имеет также решения, не обращающиеся нигде в 0 и расходящиеся на бесконечности. Они определяют ф-цию $\chi(x)$ для нейтрального атома, на границе к-рого плотность заряда остаётся отличной от 0. Физически это соответствует «сжатому» атому, заключённому в нек-рый заданный конечный объём; такая модель оказалась полезной при изучении ур-ния состояния вещества при больших степенях сжатия.

Лит.: Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика, 4 изд., М., 1989; Гомбаш П., Статистическая теория атома и ее применения, пер. с нем., М., 1951; его же, Проблема многих частиц в квантовой механике, пер. с нем., 2 изд., М., 1953; Левич В. Г., Вдовин Ю. А., Мямлин В. А., Курс теоретической физики, т. 2, М., 1962.

Э. М. Эпштейн.

ТО́МАСА — ФЕ́РМИ МЕ́ТОД — приближённый метод расчёта многочастичных квантовых систем высокой плотности; один из методов *самосогласованного поля*. Разработан Л. Томасом (L. Thomas, 1927) и независимо от него Э. Ферми (E. Fermi, 1928) для многоэлектронных атомов в осн. состоянии (*Томаса — Ферми атом*). Электрон в многоэлектронном атоме рассматривается в суммарном поле атомного ядра и всех остальных электронов, к-рые создают нек-рое центральносимметрич. поле, пропорциональное ср. плотности электронов в атоме. Ср. плотность электронов в свою очередь рассматривается как плотность вырожденного идеального *ферми-газа*, находящегося в этом ср. поле, и связана с ним через *ферми-энергию*. Это означает, что выбор ср. потенциала поля должен быть «самосогласованным».

На основе Т.— Ф. м. удалось объяснить порядок заполнения электронных оболочек в атомах, он позволяет также объяснить порядок заполнения нуклонами оболочек ядра.

ТО́МАСА — ФЕ́РМИ ТЕО́РИЯ — приближённая квазиклассич. статистич. теория неоднородных плотных многочастичных систем. Предложена для электронного газа высокой плотности Л. Томасом (L. Thomas) в 1926, развита Э. Ферми (E. Fermi) в 1928 применительно к многоэлектронным атомам. В Т.— Ф. т. распределение частиц в многочастичной системе характеризуется не волновой ф-цией, а зависящей от координат концентрацией (плотностью) частиц $n(\boldsymbol{r})$ ($\boldsymbol{r}$ — пространственная координата). При этом соотношения для однородного электронного газа применяются локально к неоднородному облаку заряда, к-рое существует в атомах, молекулах или твёрдых телах. Такое приближение оправдано, когда относит. изменение электронной плотности $n(\boldsymbol{r})$ или связанного с ней потенциала мало́ на расстояниях порядка де-бройлевской длины волны электрона.

В Т.— Ф. т. вводится понятие локального фермиевского импульса $p_F(\boldsymbol{r})$, связанного с $n(\boldsymbol{r})$ соотношением теории однородного *ферми-газа* при $T = 0$ К:

$$n(\boldsymbol{r}) = \frac{p_F^3(\boldsymbol{r})}{3\pi^2\hbar^3}. \qquad (1)$$

Ввиду неоднородности системы возникает *самосогласованное поле* с потенциалом $V(\boldsymbol{r})$, действующее на электроны. Ферми-энергия системы $\mathscr{E}_F$ не зависит от координат (в противном случае частицы могли бы переместиться в пространстве так, чтобы ещё более уменьшить энергию системы) и связана с $p_F(\boldsymbol{r})$ и $V(\boldsymbol{r})$ соотношением

$$\mathscr{E}_F = \frac{p_F^2(\boldsymbol{r})}{2m} + eV(\boldsymbol{r}), \qquad (2)$$

где m — масса частиц.

Из (1) и (2) следует соотношение

$$n(\boldsymbol{r}) = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}\left[\mathscr{E}_F - eV(\boldsymbol{r})\right]^{3/2}, \qquad (3)$$