

УДК 530.145

В. В. Т о л м а ч е в

**КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕННОЕ
РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ХАРТРИ–ФОКА
В СЛУЧАЕ ЗАМКНУТЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ
ОБОЛОЧЕК**

Построено квазиклассическое приближенное решение нелинейной системы интегродифференциальных вариационных уравнений Хартри–Фока а случае многоэлектронного атома с полностью заполненными оболочками и показано, что его отыскание сводится к решению основного дифференциального уравнения статистической модели атома Томаса–Ферми. Предложено интерпретировать метод Хартри–Фока как асимптотический метод, в котором малым параметром является большое число электронов в атоме.

Quasi-classical approximate solution of Hartry–Fock’s equations in case of closed electron envelopes / V.V. Tolmachev // Vestnik MGTU. Natural Sciences. 1998. No. 1. P. 66–78.

Quasi-classical approximate solution for non-liner system of integral-differential variational Hartry–Fock’s equations in case of a multi-electron atom with completed electron envelopes, is derived. It is shown that this derivation is reduced to that of main differential equation of Thorn as Fermi’s statistical model of atom. It is proposed to interpret Hartry–Fock’s approach as an asymptotic one where the large amount of electrons in the atom is taken as a small parameter. Refs.13.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. W e n t z e l G. Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen fur die Zwecke der Wellenmechanik // Zs. f. Physik. – 1926. – 38. – P. 518–529.
2. К р а м е р с Н. А. Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung // Zs. f. Physik. – 1926. – 39. – P. 828–840.
3. B r i l l o u i n L. The Undulatory Mechanics of Schrodinger // Comp. Rend. – 1926. – 183. – P. 24–26.
4. Л а н д а у Л. Д., Л и ф ш и ц Е. М. Квантовая механика. – М.: Физматгиз, 1963.
5. Т о л м а ч е в В. В. Квазиклассическое приближение в квантовой механике. – М.: Изд-во МГУ, 1980.

6. H a r t r e e D. R. Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. Part II. Some Results and Discussion // Proc. Cambr. Phil. Soc. – 1928. – 24. – P. 89–100; 111–132.
7. F o c k V. Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems // Zs. f. Physik. – 1930. – 61. – P. 126–148; “Selfconsistent” mit Austausch für Natrium // Zs. f. Physik. – 1930. – 62. – P. 795–805.
8. Г о м б а ш П. Проблема многих частиц в квантовой механике. – М.: ИЛ, 1953.
9. T h o m a s L. H. Effect of orbital Velocity of Electrons in Heavy Atoms on the Stopping of a Particles // Proc. Cambr. Phil. Soc. – 1927. – 23. – P. 713–716. Production Characteristic AT-Rays by Electronic Impact // Proc. Cambr. Phil. Soc. – P. 829–831.
10. F e r m i E. Application of Statistical Gas Methods to Electronic Systems // Acad. Lincei, Atti. – 1927. – 6. – P. 602–607; Statistical Method of Investigating Electrons in Atoms // Zs. f. Physik. – 1928. – 48. – P. 73–79; Über die Anwendung der statistischen Methode auf die Probleme des Atombaus // Leipziger Vorträge. – 1928. – P. 25–111.
11. Г о м б а ш П. Статистическая теория атома и ее применения. – М.: ИЛ, 1951.
12. Т о л м а ч е в В. В. Метод Хартри–Фока как метод частичного суммирования диаграмм и его естественное обобщение // Вестник ЛГУ. – 1962 – № 2. 4. – С. 11–19.
13. Т о л м а ч е в В. В. Интерпретация метода Хартри–Фока как метода частичного суммирования атомных фейнмановских диаграмм // Acta Physica Hungaricae. – 1969 – № 27. – С. 351–371.

Статья поступила в редакцию 27.10.1997

Владимир Вениаминович Толмачев родился в 1930 г., окончил МГУ им. М.В. Ломоносова в 1953 г. Д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры “Физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Член-корреспондент РАН. Автор более 150 научных работ в том числе 7 монографий, в области математической теоретической физики.

V.V. Tolmachev (b. 1930) graduated from the Lomonosov Moscow State University in 1953. D. Sc. (Phys.-Math.), professor of “Physics” Department of the Bauman Moscow State Technical University. Corresponding member of the Russian Academy of Natural Sciences. Author of more than 150 publications, among them 7 monographs, in the field of mathematical theoretical physics.