

## КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В НЕКОТОРЫХ ЭЛЕКТРОН-ИОННЫХ СИСТЕМАХ

*Шпатаковская Г.В.*

*ИММ РАН, Москва*

*shpat@imamod.ru*

Предложен улучшенный аналитический метод расчета осцилляций плотности в свободном атоме и металлическом кластере. Конкретные расчеты основаны на предварительном вычислении усредненного распределения электронной плотности, потенциала и энергии.

Настоящая работа является продолжением серии работ [1–5], в которых на основе модельных потенциалов исследовались электронные спектры и оболочечные эффекты в атоме и кластере при нулевой и конечной температурах.

Метод расчета усредненных характеристик базируется на квазиклассическом приближении в теории функционала плотности — усовершенствованной модели Томаса–Ферми (УТФ) для сферически симметричных электрон-ионных систем. Более подробно эта модель и расчеты по ней описаны в работе [6].

Предложенное в настоящей работе единое выражение для осцилляционной поправки к электронной плотности дает, в частности, в центре сферического кластера следующую величину осцилляционной поправки:

$$\rho_{osc}(R_\mu) \cong (-1)^{m+1} \frac{\rho_\mu(0)}{4\pi r_\mu^0}, \quad m - \frac{1}{2} \leq \frac{2\sigma_\mu^0}{\pi} \leq m + \frac{1}{2},$$

где  $\rho_\mu(r)$ ,  $\sigma_\mu^0$ ,  $r_\mu^0$  — классические импульс, полное действие и время для  $s$ -электрона с энергией, равной химическому потенциалу  $\mu$ .

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты №96-15-96616, 02-01-00185).

1. Шпатаковская Г.В. // Письма в ЖЭТФ. 1999. Т.70. С.333.
2. Шпатаковская Г.В. // ЖЭТФ. 2000. Т.118. С.87.
3. Шпатаковская Г.В. // Письма в ЖЭТФ. 2000. Т.72. С.394.
4. Шпатаковская Г.В. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т.73. С.306.
5. Шпатаковская Г.В. // Физика экстремальных состояний вещества — 2002 / Под ред. Фортова В.Е. и др. Черногловка: ИПХФ РАН, 2002. С.9.
6. Карпов В.Я., Шпатаковская Г.В. // Электронный журнал «Исследовано в России». 2002. Т.191. С.2118.