

**ОБОБЩЕНИЕ ТЕОРИИ ТОМАСА — ФЕРМИ
ДЛЯ ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА**

А.А. Теребиж

anna.terebizh@gmail.com

SPIN-код: 3789-3018

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Представлено обобщение классического выражения теории Томаса — Ферми для случая двумерного электронного газа. Рассмотрено влияние градиентов электронной плотности, отвечающих за возникновение неоднородностей в реальных системах, в рамках обобщенного градиентного разложения. Показан вывод приближения электронной плотности через разложение функции по коммутаторам операторов физических величин координаты и импульса. Учтена взаимосвязь между химическим потенциалом системы и внешним полем. Получено дифференциальное уравнение, необходимое для определения характеристик системы, которое в явном виде зависит от размерности пространства. В обоснование правильности результатов для двумерного случая из выведенного D -мерного уравнения были получены широко известные результаты для трехмерного случая. Построен функционал кинетической энергии, зависящий от электронной плотности и описывающий поведение неоднородного двумерного электронного облака.

Ключевые слова

Метод функционала плотности, обобщенное градиентное разложение, градиентные поправки, метод Киржница, теория Томаса — Ферми, электронная плотность, двумерный электронный газ, функционал кинетической энергии

Поступила в редакцию 31.03.2023

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2023

Введение. Квантовая механика позволяет проводить точные расчеты только для атомов водорода и гелия [1]. Поэтому с развитием материаловедения, химии, молекулярной биологии, нанoeлектроники и многих отраслей физики, в том числе физики конденсированного состояния, особо актуальным стал вопрос о том, как можно рассчитать различные многочастичные системы, образованные большим числом атомных ядер и электронов. Основная трудность заключается в том, что решение этой проблемы путем непосредственного решения уравнения Шредингера, а также использование численных методов его решения или применение теории возмущений требует огромных вычислительных затрат, зачастую недоступных даже в современных условиях развития компьютерной техники. Именно по этой причине в течение многих лет была актуальной проблема отыскания альтернативного метода расчета многочастичных квантомеханических систем. Теория функционала плотности стала наиболее по-

пулярным и полезным вычислительным подходом как для изучения многоэлектронных систем в их основном состоянии, так и для решения более широкого спектра задач исследования и моделирования различных наноматериалов [2]. Такую популярность теории функционалов плотности можно объяснить относительной простотой и эффективностью вычислительных методов.

Теоретический анализ. Теория функционалов плотности берет свое начало в подходе, который разработали Люэлин Томас и Энрико Ферми [3, 4]. В рамках предложенного ими подхода кинетическая энергия электронов была аппроксимирована некоторым выражением, применимым для описания электронного облака. Тем не менее это выражение может быть применено для учета взаимодействия электронов и внешнего поля. Функционал полной энергии многоэлектронной системы в рамках теории Томаса — Ферми выглядит следующим образом [5]:

$$E_{TF}[\rho(\mathbf{r})] = \frac{3}{10} \frac{h^2}{M} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{2/3} \int (\rho(\mathbf{r}))^{5/3} d\mathbf{r} + \int V(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}', \quad (1)$$

где e и M — заряд и масса электрона соответственно; h — постоянная Планка; $\rho(\mathbf{r})$ — функция электронной плотности, зависящая лишь от пространственных координат; \mathbf{r} — радиус-вектор точки наблюдения; \mathbf{r}' — радиус-вектор, характеризующий положение электрона, с которым происходит взаимодействие; $V(\mathbf{r})$ — внешний потенциал. В этом выражении первое слагаемое представляет собой функционал кинетической энергии, второе и третье слагаемое соответственно содержат внешний потенциал и энергию взаимодействия электронов. Минимизируя этот функционал, можно найти энергию основного состояния рассматриваемой системы.

Недостатки теории Томаса — Ферми обусловлены тем, что в настоящее время актуально рассмотрение сильно неоднородных систем, в которых электронная плотность сильно изменяется в пространстве. Так что выражение (1) служит основной отправной точкой для многих актуальных на сегодняшний день приближений [6]. Наиболее широкое применение получил так называемый метод градиентного разложения [7]:

$$T^{GEA}[\rho(\mathbf{r})] = \sum_{i=0}^n \int T_i(\rho(\mathbf{r}), |\nabla\rho(\mathbf{r})|, |\nabla\rho(\mathbf{r})|^2, |\nabla\rho(\mathbf{r})|^4, \dots) d\mathbf{r},$$

где $T_0[\rho(\mathbf{r})]$ совпадает с выражением кинетической энергией Томаса — Ферми, то есть первым слагаемым в выражении (1), а T_2, T_4, \dots — градиентные поправки второго, четвертого и т. д. порядка [8].

Рассмотрим теперь обобщение теории Томаса — Ферми и учет градиентной поправки для двумерного электронного газа. Впоследствии это обобщение поз-

волит проводить расчеты для квазидвумерных систем, таких как, к примеру, тонкие пленки, с большей точностью.

Математическая модель. Рассмотрим гиперкубический объем (D — размерность пространства), в котором находится идеальный спин-поляризованный ферми-газ. Число частиц N задается выражением

$$N = \int \frac{d^D \mathbf{r} d^D \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^D} \theta\left(\bar{\mu} - \frac{p^2}{2M}\right).$$

Здесь $\theta(\cdot)$ — функция Хевисайда; \mathbf{p} — импульс частицы; \hbar — приведенная постоянная Планка; $\bar{\mu}$ — химический потенциал, численно совпадающий с энергией Ферми рассматриваемой системы. Это уравнение после интегрирования по координатам \mathbf{r} и импульсам \mathbf{p} дает выражение для равномерной функции электронной плотности:

$$\rho = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{D/2} \frac{D}{2\Gamma(D/2+1)} F_D(\bar{\mu}), \text{ где } F_D(\bar{\mu}) = \int_0^\infty z^{D/2-1} \theta(\bar{\mu} - z) dz = \frac{2}{D} \bar{\mu}^{D/2}.$$

где $\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция; $F_D(\bar{\mu})$ отвечает за количество состояний с энергией, меньше или равной энергии Ферми. Будем рассматривать систему в рамках локального приближения плотности, т. е. введем локальный химический потенциал $\mu(\mathbf{r}) = \bar{\mu} - V(\mathbf{r})$. Учтем при этом, что локальный химический потенциал в некоторых точках может принимать значения $\bar{\mu} = V(\mathbf{r})$. Необходимо также учесть градиентную поправку на неоднородность электронного облака в виде квадрата градиента плотности, что обусловлено пространственной симметрией системы.

В свою очередь, точную локальную функцию плотности можно записать с помощью собственного вектора $|\mathbf{r}\rangle$ оператора координаты и собственного вектора $|\mathbf{p}\rangle$ оператора импульса следующим образом:

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{p} | \hat{N} | \mathbf{r} \rangle = \int \frac{d^D \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \langle \mathbf{r} | \hat{N} | \mathbf{r} \rangle \exp\left(-\frac{i\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right). \quad (2)$$

Согласно Киржницу [9, 10], оператор количества частиц \hat{N} можно представить в виде разложения по степеням \hbar с использованием коммутационных соотношений операторов химического потенциала и энергий. Используем это разложение для выражения (2) аналогично методам теории возмущения, в итоге во втором порядке \hbar получим уравнение

$$\rho(\mathbf{r}) = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2}\right)^{D/2} \frac{D}{2\Gamma(D/2+1)} \left\{ F_D(\mu(\mathbf{r})) + \frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{6} \nabla^2 \mu(\mathbf{r}) F_D''(\mu(\mathbf{r})) + \frac{1}{12} (\nabla \mu(\mathbf{r}))^2 F_D'''(\mu(\mathbf{r})) \right] \right\}.$$

Наконец, окончательное выражение может быть записано следующим образом:

$$\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{D-2}{3D} \right) \left[\frac{1}{4} \frac{(\nabla \rho(\mathbf{r}))^2}{\rho^2(\mathbf{r})} - \frac{1}{2} \frac{\nabla^2 \rho(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})} \right] + \frac{2\pi\hbar^2}{M} \Gamma\left(\frac{D}{2} + 1\right)^{2/D} \rho(\mathbf{r})^{2/D} + V(\mathbf{r}) = \bar{\mu}. \quad (3)$$

Как и следовало ожидать, выражение явно зависит от размерности пространства.

Для того чтобы убедиться в корректности полученного результата, рассмотрим трехмерный случай ($D = 3$). Тогда из выражения (3) получается

$$\rho(\mathbf{r}) = \left(\frac{2M\mu(\mathbf{r})}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{1}{6\pi^2} \left\{ 1 + \frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{8} \frac{\nabla^2 \mu(\mathbf{r})}{\mu^2(\mathbf{r})} - \frac{1}{32} \frac{(\mu(\mathbf{r}))^2}{\mu^3(\mathbf{r})} \right] \right\},$$

что представляет собой широко известный и хорошо исследованный результат [11].

Обсуждение полученных результатов. В двумерном случае получены следующие результаты: множитель при функции электронной плотности $C_{TF} = \frac{\pi\hbar^2}{M}$; множитель при градиентной поправке обращается в нуль, показатель степени при функции электронной плотности равен двум. Таким образом, можно сделать вывод о том, что в двумерном случае электронный газ достаточно точно описывается с помощью выражения Томаса — Ферми, модифицированного с учетом размерности пространства. Окончательное выражение для кинетической энергии двумерного электронного газа принимает следующий вид:

$$T^{TF}[\rho(\mathbf{r})] = \frac{\pi\hbar^2}{M} \int \rho^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Заключение. Подводя итоги, сделаем вывод, что полученная аппроксимация классического выражения теории Томаса — Ферми на двумерный случай может быть использована для исследования реальных квазидвумерных многоэлектронных систем, таких как, например, тонкие проводящие пленки [12]. Таким образом, можно получить достаточно точные приближения, которые позволят рассчитывать различные наноэлектронные системы, представляющие интерес с точки зрения современного развития науки и техники.

Литература

- [1] Bethe H.A., Salpeter E.E. *Quantum mechanics of one-and two-electron atoms*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [2] Сатанин А.М. *Введение в теорию функционала плотности*. Нижний Новгород, НГУ, 2009, 64 с.
- [3] Thomas L.H. The calculation of atomic fields. *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society*, 1927, vol. 23, no. 5, pp. 542–548.
<https://doi.org/10.1017/S0305004100011683>
- [4] Fermi E. Un metodo statistico per la determinazione di alcune priorieta dell'atom. *Rend. Accad. Naz. Lincei.*, 1927, vol. 6, no. 602–607.
- [5] Балашов В.В., Долинов В.К. *Курс квантовой механики*. Ижевск, Регулярная и хаотическая динамика, 2001, 336 с.
- [6] Salazar E.X., Guarderas P.F., Ludeña E.V. et al. Study of some simple approximations to the non-interacting kinetic energy functional. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2016, vol. 116, no. 17, pp. 1313–1321. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1601.01721>
- [7] Francisco H.I., Carmona-Espíndola J., Gázquez J.L. Analysis of the kinetic energy functional in the generalized gradient approximation. *The Journal of Chemical Physics*, 2021, vol. 154, no. 8, art. 084107. <https://doi.org/10.1063/5.0040973>
- [8] Hodges C.H. Quantum Corrections to the Thomas–Fermi Approximation — The Kirzhnits Method. *Canadian Journal of Physics*, 1973, vol. 51 (13), pp. 1428–1437.
<https://doi.org/10.1139/p73-189>
- [9] Kirzhnits D.A. Quantum Corrections to the Thomas-Fermi Equation. *Sov. Phys. JETP*, 1957, vol. 5, no. 64, pp. 58–64.
- [10] Киржниц Д.А. *Полевые методы теории многих частиц*. Москва, Атомиздат, 1963, 345 с.
- [11] Dreizler R.M., Gross E.K.U. *Density functional theory: an approach to the quantum many-body problem*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [12] Naghdi S. et al. A review of conductive metal nanomaterials as conductive, transparent, and flexible coatings, thin films, and conductive fillers: different deposition methods and applications. *Coatings*, 2018, vol. 8, no. 8, p. 278. <https://doi.org/10.3390/coatings8080278>

Теребиж Анна Александровна — студентка кафедры «Физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Научный руководитель — Ерквич Ольга Станиславовна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Теребиж А.А. Обобщение теории Томаса — Ферми для двумерного электронного газа. *Политехнический молодежный журнал*, 2023, № 05 (82).
<http://dx.doi.org/10.18698/2541-8009-2023-5-897>

**GENERALIZATION OF THE THOMAS — FERMI THEORY
FOR THE TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS**

A.A. Terebizh

anna.terebizh@gmail.com

SPIN-code: 3789-3018

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation**Abstract**

The paper presents generalization of the classical expression of the Thomas — Fermi theory for the case of the two-dimensional electron gas. The effect of electron density gradients responsible for inhomogeneities in real systems was considered within the framework of the generalized gradient expansion. Derivation of the electron density approximation through the function expansion in terms on commutators of the operators of the coordinate and momentum physical values is shown. Relationship between the system chemical potential and the external field was taken into account. A differential equation was obtained necessary to determine characteristics of the system, which explicitly depended on the space dimension. To substantiate correctness of the results for the two-dimensional case, widely known results for the three-dimensional case were obtained from the derived D -dimensional equation. Kinetic energy functional was constructed that depended on the electron density and described behavior of the inhomogeneous two-dimensional electron cloud.

Keywords

Density functional method, generalized gradient expansion, gradient corrections, Kirzhnits method, Thomas — Fermi theory, electron density, two-dimensional electron gas, kinetic energy functional

Received 31.03.2023

© Bauman Moscow State Technical University, 2023

References

- [1] Bethe H.A., Salpeter E.E. *Quantum mechanics of one-and two-electron atoms*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [2] Satanin A.M. *Vvedenie v teoriyu funktsionala plotnosti* [Introduction to the density functional theory]. Nizhny Novgorod, NSU Publ., 2009, 64 p. (In Russ.).
- [3] Thomas L.H. The calculation of atomic fields. *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society*, 1927, vol. 23, no. 5, pp. 542–548. <https://doi.org/10.1017/S0305004100011683>
- [4] Fermi E. Un metodo statistico per la determinazione di alcune priorieta dell'atom. *Rend. Accad. Naz. Lincei.*, 1927, vol. 6, no. 602–607.
- [5] Balashov V.V., Dolinov V.K. *Kurs kvantovoy mekhaniki* [Quantum mechanics course]. Izhevsk, Regul'yarnaya i khaoticheskaya dinamika Publ., 2001, 336 p. (In Russ.).
- [6] Salazar E.X., Guarderas P.F., Ludeña E.V. et al. Study of some simple approximations to the non-interacting kinetic energy functional. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2016, vol. 116, no. 17, pp. 1313–1321. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1601.01721>

- [7] Francisco H.I., Carmona-Espíndola J., Gázquez J.L. Analysis of the kinetic energy functional in the generalized gradient approximation. *The Journal of Chemical Physics*, 2021, vol. 154, no. 8, art. 084107. <https://doi.org/10.1063/5.0040973>
- [8] Hodges C.H. Quantum Corrections to the Thomas–Fermi Approximation — The Kirzhnits Method. *Canadian Journal of Physics*, 1973, vol. 51 (13), pp. 1428–1437. <https://doi.org/10.1139/p73-189>
- [9] Kirzhnits D.A. Quantum Corrections to the Thomas-Fermi Equation. *Sov. Phys. JETP*, 1957, vol. 5, no. 64, pp. 58–64.
- [10] Kirzhnits D.A. *Polevye metody teorii mnogikh chastits* [Field methods of the theory of many particles]. Moscow, Atomizdat Publ., 1963, 345 p. (In Russ.).
- [11] Dreizler R.M., Gross E.K.U. *Density functional theory: an approach to the quantum many-body problem*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [12] Naghdi S. et al. A review of conductive metal nanomaterials as conductive, transparent, and flexible coatings, thin films, and conductive fillers: different deposition methods and applications. *Coatings*, 2018, vol. 8, no. 8. <https://doi.org/10.3390/coatings8080278>

Terebizh A.A. — Student, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Scientific advisor — Erkovich O.S., Ph. D. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Please cite this article in English as:

Terebizh A.A. Generalization of the Thomas — Fermi theory for the two-dimensional electron gas. *Politekhnicheskii molodezhnyy zhurnal*, 2023, no. 05 (82). (In Russ.). <http://doi.org/10.18698/2541-8009-2023-5-897>