

## 뺨송-페르미-디랙방정식의 한가지 수치풀이방법에 대한 연구

김형군, 홍권룡

류체력학적모의는 원자로에서의 열수력학적과정과 핵융합의 미시적과정을 비롯하여 원자력분야는 물론 여러 부문에서 중요하게 리용된다.[1] 이로부터 류체력학적모의에 대한 많은 계산프로그램들이 개발되어 리용되고있다.[2] 류체력학적모의에서 얻어지는 결과의 믿음성은 프로그램에서 리용되는 열력학적상태방정식과 같은 물성자료들에 의존한다.

고온, 고밀도령역에서 잘 맞는 유한온도토마스-페르미모형에 기초하여 전자계의 상태방정식을 계산하기 위해서는 뺨송-페르미-디랙방정식을 풀어서 포텐샬에너지를 얻은 다음 전자의 페르미-디랙분포로부터 자유에너지를, 내부에너지를, 비열, 이온화도와 같은 필요한 열력학적상태량들을 결정하여야 한다. 여기서 중요한것은 뺨송-페르미-디랙방정식을 수치풀이하는것이다. 뺨송-페르미-디랙방정식은 일반적인 방법으로는 수치풀이할수 없으며 수렴성도 제대로 보장되지 않는다.

론문에서는 토마스-페르미모형에 기초한 뺨송-페르미-디랙방정식에 대하여 높은 수렴속도를 보장하는 한가지 수치풀이방법에 대하여 연구하였다.

### 1. 뺨송-페르미-디랙방정식

토마스-페르미모형은 다전자계에 대한 통계적모형으로서 1개의 원자에 대하여 적용되었으며 그 이후에 임의의 온도와 밀도에로 일반화되었다. 이 모형은 조밀매질에 대한 가장 단순한 모형으로서 전자에 대한 페르미-디랙분포와 반고전근사에 기초하고있다. 다시말하여 원자의 전자들은 페르미-디랙분포에 따르지만 위상공간에서 연속적으로 분포되어있다고 가정한다.[3]

전자는 페르미-디랙분포에 따르는데 외부마당속에 놓인 리상전자기체인 경우에 그 구체적인 분포형태는 다음과 같다.

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{1 + \exp \left[ \frac{\mathbf{p}^2 / (2m_e) + V(\mathbf{r}) - \mu}{kT} \right]} \quad (1)$$

여기서  $\mathbf{r}$  와  $\mathbf{p}$  는 전자의 위치와 운동량,  $\mu$  는 화학포텐샬이며  $k$  는 볼츠만상수,  $m_e$  는 전자의 질량이다. 그리고  $V(\mathbf{r})$  는 포텐샬에너지를 전자-핵, 전자-전자호상작용포텐샬에너지를외에 여러가지 보정항들(교환, 상관, 량자 등)로 이루어진다.

토마스-페르미모형에서는 이러한 보정항이 없다. 즉

$$V(\mathbf{r}) = -e\phi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

로 표시할수 있다. 여기서  $\phi(\mathbf{r})$  는 정전기적포텐샬로서 뺨송방정식

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\frac{q(\mathbf{r})}{\varepsilon_0} \quad (3)$$

를 만족한다. 여기서  $\varepsilon_0$  은 전기상수이고  $q(\mathbf{r})$  는 전체 전하밀도로서 전자와 핵의 전하밀도로 구성된다.

$$q(\mathbf{r}) = q_e(\mathbf{r}) + q_n(\mathbf{r}) = -en(\mathbf{r}) + Ze\delta(\mathbf{r}) \quad (4)$$

여기서  $Z$  는 핵의 전하수이고 핵의 위치를 자리표원점으로 잡았다. 전자수밀도  $n(\mathbf{r})$  는 식 (1) 을 운동량공간에 대하여 적분하여 얻는다.

$$n(\mathbf{r}) = \int n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{h^3} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} I_{1/2} \left( \frac{\mu - V(\mathbf{r})}{kT} \right) \quad (5)$$

여기서  $\hbar$  는 플랑크상수,  $h = 2\pi\hbar$  이며

$$I_k(x) = \int_0^\infty \frac{y^k dy}{1 + \exp(y - x)}$$

는 페르미-디랙적분이다. 식 (4)와 (5)를 (3)에 대입하면 다음과 같은 식이 얻어진다.

$$\Delta V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0} \left[ \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} I_{1/2} \left( \frac{\mu - V(\mathbf{r})}{kT} \right) - Z\delta(\mathbf{r}) \right] \quad (6)$$

경계조건으로서 우선 원자사이경계에서 포텐셜이 0이 된다는 조건

$$V(\mathbf{r})|_B = 0 \quad (7)$$

이 성립한다. 그리고 전하중성조건

$$\int_C \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0$$

으로부터

$$\left. \frac{\partial V}{\partial n} \right|_B = 0 \quad (8)$$

이 나온다. 한편 원점근방에서는 핵포텐셜이 우세하므로

$$rV(\mathbf{r})|_{r=0} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \quad (9)$$

이 성립한다.

식 (6)과 경계조건을 나타내는 식 (7)-(9)는 하나의 닫힌방정식계를 이루는데 이것이 바로 뽀송-페르미-디랙방정식이다. 경계조건이 하나 더 존재하는것은 방정식에 들어있는 미지량인 화학포텐셜을 계산하기 위한 조건으로 된다.

일반적으로 뽀송-페르미-디랙방정식은 해석적으로 적분불가능한 페르미-디랙적분을 포함하는 비선형2계미분방정식인데다가 미지파라미터인 화학포텐셜까지 들어있으므로 그 풀이를 구하는것은 매우 어렵다. 그러나 고밀도령역에서는 전자의 각구조가 완전히 파괴되므로 계를 충분히 구대칭계로 가정할수 있다. 특히 단순물인 경우에는 더욱 그러하다. 구대칭성을 가정하여 무본화된 방정식과 경계조건을 이끌어내면 다음과 같다.

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4}{\pi r_B} \left( \frac{2m_e k\tau}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left( \frac{3}{4\pi N_A} \right)^{2/3} \sigma^{-2/3} x I_{1/2} \left( \frac{\varphi}{x} \right) \quad (10)$$

$$\varphi(1) = \frac{\mu}{kT}, \quad \varphi'(1) = \varphi(1), \quad \varphi(0) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 k} \left( \frac{4\pi N_A}{3} \right)^{1/3} \sigma^{1/3} \tau^{-1} \quad (11)$$

여기서  $x = \frac{r}{r_0}$  이고  $\sigma = \frac{\rho}{AZ}$ ,  $\tau = \frac{T}{Z^{4/3}}$  는 무분화된 밀도와 온도파라미터이며

$$I_m(x) = \int_0^\infty \frac{y^m dy}{1 + \exp(y-x)}$$

는 페르미-디랙적분이다. 그리고  $r_0 = \left( \frac{3}{4\pi N_A} \frac{A}{\rho} \right)^{1/3}$  (여기서  $A$ ,  $\rho$  는 각각 원자의 질량수와 밀도,  $N_A$  는 아보가드로수)은 원자의 반경이고  $r_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e}$  은 보아반경이다.

상수들을 대입하면 식 (10)과 (11)은 다음과 같이 표시된다.

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = 61.750 \, 6\sigma^{-2/3} \tau^{1/2} x I_{1/2} \left( \frac{\varphi}{x} \right) \quad (12)$$

$$\varphi(1) = \frac{\mu}{kT} = -\eta, \quad \varphi'(1) = \varphi(1), \quad \varphi(0) = 2 \, 274.7\sigma^{1/3} \tau^{-1} \quad (13)$$

식 (12)는 비선형상미분방정식으로서 특수한 반복법을 리용하여야 효과적으로 풀수 있다. 경계조건의 첫 식은 화학포텐셜을 결정하는 식이다.

## 2. 뽕송-페르미-디랙방정식의 수치풀이방법

식 (12)를 다음과 같이 변형하자.

$$\frac{d^2\varphi^{(s+1)}}{dx^2} = ax \left[ I_{1/2} \left( \frac{\varphi^{(s)}}{x} \right) + \frac{\varphi^{(s+1)} - \varphi^{(s)}}{2x} I_{-1/2} \left( \frac{\varphi^{(s)}}{x} \right) \right] \quad (14)$$

$$\varphi'(1) = \varphi(1), \quad \varphi(0) = \varphi_0 \quad (15)$$

여기서  $a = 61.750 \, 6\sigma^{-2/3} \tau^{1/2}$ ,  $\varphi_0 = 2 \, 274.7\sigma^{1/3} \tau^{-1}$  이다.

고찰구간  $(0, 1)$  을  $N$  개의 구간으로 나누면 ( $x_0 = 0, \dots, x_N = 1$ ) 다음과 같은 식이 얻어진다.

$$\frac{2}{h_{i-1} + h_i} \left[ \frac{\varphi_{i-1}^{(s+1)} - \varphi_i^{(s+1)}}{h_{i-1}} + \frac{\varphi_{i+1}^{(s+1)} - \varphi_i^{(s+1)}}{h_i} \right] = ax_i I_{1/2} \left( \frac{\varphi_i^{(s)}}{x_i} \right) + \frac{a}{2} I_{-1/2} \left( \frac{\varphi_i^{(s)}}{x_i} \right) - \frac{a}{2} I_{-1/2} \left( \frac{\varphi_i^{(s)}}{x_i} \right) \varphi_i^{(s)} \quad (16)$$

여기서  $h_i = x_{i+1} - x_i$  이다.  $x=1$  에서의 경계조건은

$$\varphi_{N-1} = \varphi_N - h_{N-1} \varphi'_N + \frac{1}{2} h_{N-1}^2 \varphi''_N, \quad \varphi'_N = \varphi_N, \quad \varphi''_N = a I_{1/2}(\varphi_N)$$

으로부터 다음과 같이 표시된다.

$$\varphi_N^{(s+1)} = \varphi_{N-1}^{(s+1)} + h_{N-1} \varphi_N^{(s+1)} - \frac{1}{2} a h_{N-1}^2 \left[ I_{1/2}(\varphi_N^{(s)}) + \frac{\varphi_N^{(s+1)} - \varphi_N^{(s)}}{2} I_{-1/2}(\varphi_N^{(s)}) \right] \quad (17)$$

이상의 결과들을 종합하면

$$a_i \varphi_{i-1}^{(s+1)} + b_i \varphi_i^{(s+1)} + c_i \varphi_{i+1}^{(s+1)} = d_i \quad (18)$$

와 같은 세줄대각선련립방정식이 얻어진다. 여기서 해당하는 결수들은 다음과 같다.

$$a_i = \frac{1}{h_{i-1}}, \quad c_i = \frac{1}{h_i} \quad (i=1, \dots, N-1), \quad a_N = 1, \quad c_0 = c_N = 0$$

$$b_0 = 1, \quad b_i = -\frac{1}{h_{i-1}} - \frac{1}{h_i} - \frac{1}{2}(h_{i-1} + h_i)f_i^{(s)} \quad (i=1, \dots, N-1), \quad b_N = -1 + h_{N-1} - \frac{h^2}{2}f_N^{(s)}$$

$$d_0 = \varphi_0, \quad d_i = \frac{h_{i-1} + h_i}{2} \left[ g_i^{(s)} - f_i^{(s)} \varphi_i^{(s)} \right] \quad (i=1, \dots, N-1), \quad d_N = \frac{h_{N-1}^2}{2} \left[ g_N^{(s)} - f_N^{(s)} \varphi_N^{(s)} \right]$$

$$f_i^{(s)} = \frac{a}{2} I_{-1/2} \left( \frac{\varphi_i^{(s)}}{x_i} \right), \quad g_i^{(s)} = ax_i I_{1/2} \left( \frac{\varphi_i^{(s)}}{x_i} \right)$$

초기근사는 균일전자밀도모형으로부터 얻는다.

$$\varphi^{(0)}(x) = \varphi_0 \left( 1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3 \right) - \eta^{(0)}x, \quad I_{1/2}(-\eta^{(0)}) = \frac{3\varphi_0}{a} \quad (19)$$

### 3. 계산결과와 해석

금( $Z=79$ ,  $A=196.967$ ,  $\rho=19.3\text{g/cm}^3$ )에 대하여 공간분할수와 반복회수에 따르는  $\eta$ 의 계산결과를 표 1-4에 주었다. 여기서  $n$ 은 공간분할수,  $m$ 은 반복회수이다.

표 1.  $T=0.01\text{keV}$ 일 때  $\eta$ 의 수치풀이결과(정확한 값  $\eta=2.78$ )

$m \backslash n$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
100	0.160 5	0.931 1	1.636 8	2.261 3	2.661 8	2.764 7	2.769 4	2.769 4	2.769 4
200	0.160 5	0.931 0	1.636 8	2.262 4	2.666 0	2.771 2	2.776 0	2.776 0	2.776 0
500	0.160 4	0.931 0	1.636 9	2.262 9	2.667 7	2.773 7	2.778 7	2.778 7	2.778 7
1 000	0.160 4	0.931 0	1.636 9	2.262 9	2.668 1	2.774 3	2.779 3	2.779 3	2.779 3
2 000	0.160 4	0.931 0	1.636 9	2.263 0	2.668 2	2.774 5	2.779 4	2.779 5	2.779 5

표 2.  $T=0.1\text{keV}$ 일 때  $\eta$ 의 수치풀이결과(정확한 값  $\eta=4.75$ )

$m \backslash n$	1	2	3	4	5	6	7
100	3.571 4	3.957 3	4.359 7	4.651 7	4.731 2	4.734 8	4.734 8
200	3.571 4	3.957 4	4.361 2	4.657 4	4.739 8	4.743 6	4.743 6
500	3.571 4	3.957 4	4.361 8	4.659 7	4.743 2	4.747 2	4.747 3
1 000	3.571 4	3.957 4	4.361 9	4.660 2	4.744 0	4.748 0	4.748 0
2 000	3.571 4	3.957 4	4.362 0	4.660 3	4.744 2	4.748 3	4.748 3

표 3.  $T=1\text{keV}$ 일 때  $\eta$ 의 수치풀이결과(정확한 값  $\eta=6.99$ )

$m \backslash n$	1	2	3	4	5	6
500	6.905 2	6.978 6	6.982 3	6.982 3	6.982 3	6.982 3
1 000	6.906 1	6.980 4	6.984 1	6.984 1	6.984 1	6.984 1
2 000	6.906 4	6.981 0	6.984 8	6.984 8	6.984 8	6.984 8
5 000	6.906 6	6.981 2	6.985 0	6.985 0	6.985 0	6.985 0
10 000	6.906 6	6.981 3	6.985 1	6.985 1	6.985 1	6.985 1

표 4.  $T=10\text{keV}$ 일 때  $\eta$ 의 수치풀이결과(정확한 값  $\eta=10.1$ )

$m \backslash n$	1	2	3	4	5	6
1 000	10.139	10.139	10.139	10.139	10.139	10.139
2 000	10.140	10.140	10.140	10.140	10.140	10.140
5 000	10.141	10.141	10.141	10.141	10.141	10.141
10 000	10.141	10.141	10.141	10.141	10.141	10.141
20 000	10.141	10.141	10.141	10.141	10.141	10.141

초기근사로 균일전자밀도모형이 아닌 다른 임의의 조건을 주면 반복회수가 5회에서 12회정도로 많아지며 이때 보다 정확한 값으로 다가간다. 즉 이 방법은 초기근사에 거의 무관계하다고 볼수 있다. 이 방법이 수치적으로 안정한것은 비선형항인 페르미-디랙적분을 잘 변형시켰기때문이다.

## 맺 는 말

유한온도토마스-페르미모형에 기초한 물질의 상태방정식구축에서 제기되는 뽕뚱-페르미-디랙방정식의 수치풀이를 넓은 온도대역에서 진행하고 선행자료와 비교하여 그 믿음을 확증하였다.

## 참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 63, 9, 85, 주체106(2017).
- [2] G. I. Kerley; EOSPro Code, 19~35, KTS, 2010.
- [3] A. F. Nikiforov et al.; Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter, 439~457, Birkhäuser Verlag, 2005.

주체106(2017)년 12월 5일 원고접수

## Research on a Method for the Numerical Solution of the Poisson-Fermi-Dirac Equations

Kim Hyong Gun, Hong Kwon Ryong

We suggested a method for the numerical solution of the Poisson-Fermi-Dirac equations, which often appeared in construction of thermodynamic equation of states of material based on the finite temperature Thomas-Fermi model, the model of quantum statistical mechanics.

Key words: Thomas-Fermi model, Poisson equation, Fermi-Dirac distribution, Poisson-Fermi-Dirac equation