

Атомная физика

Лекция 10

проф. Попов Александр Михайлович

Многочастичные (многоэлектронные) системы

1. Невозможность факторизации волновой функции взаимодействующих частиц на одночастичные состояния

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) ???$$

2. Концепция самосогласованного поля. Метод Хартри (1927)

Плотности заряда, создаваемые электронами

$$\rho_i(\vec{r}_i) = e|\psi_i(\vec{r}_i)|^2$$

Электростатические потенциалы

$$\varphi_1(\vec{r}) = \int \frac{\rho_1(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d^3 r_1 \quad \varphi_2(\vec{r}) = \int \frac{\rho_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} d^3 r_2$$

Потенциальная энергия взаимодействия с ядром и электронным остовом

$$V_1^{(eff)}(\vec{r}_1) = -\frac{Ze^2}{r_1} + e\varphi_2(\vec{r}_1)$$

$$V_2^{(eff)}(\vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{r_2} + e\varphi_1(\vec{r}_2)$$

Уравнения Хартри

$$\left(\hat{T}_1 + \hat{V}_1^{(eff)}(\vec{r}_1)\right)\psi_1(\vec{r}_1) = E_1\psi_1(\vec{r}_1)$$

$$\left(\hat{T}_2 + \hat{V}_2^{(eff)}(\vec{r}_2)\right)\psi_2(\vec{r}_2) = E_2\psi_2(\vec{r}_2)$$

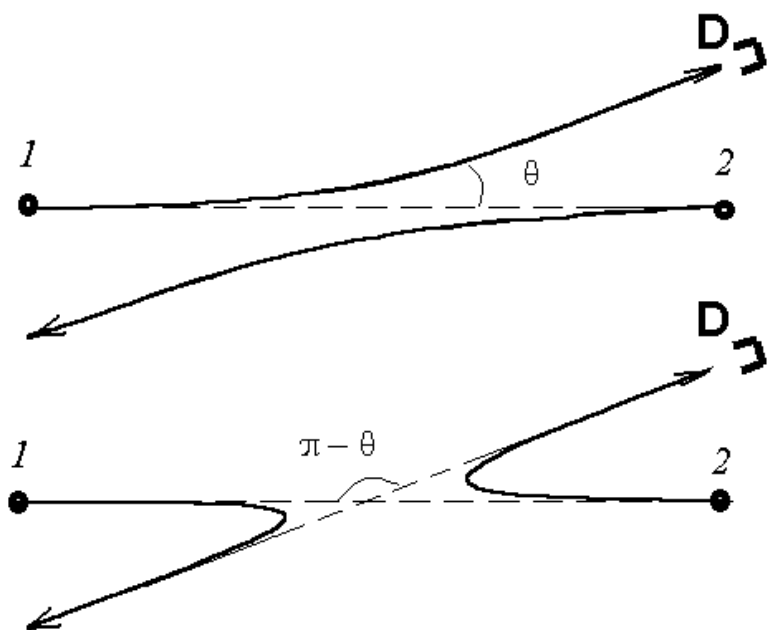
$$E = E_1 + E_2 - \left\langle \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \left| \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right| \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \right\rangle$$

3. Одночастичная оболочечная модель ядра и ее недостатки

А если частицы не взаимодействуют?

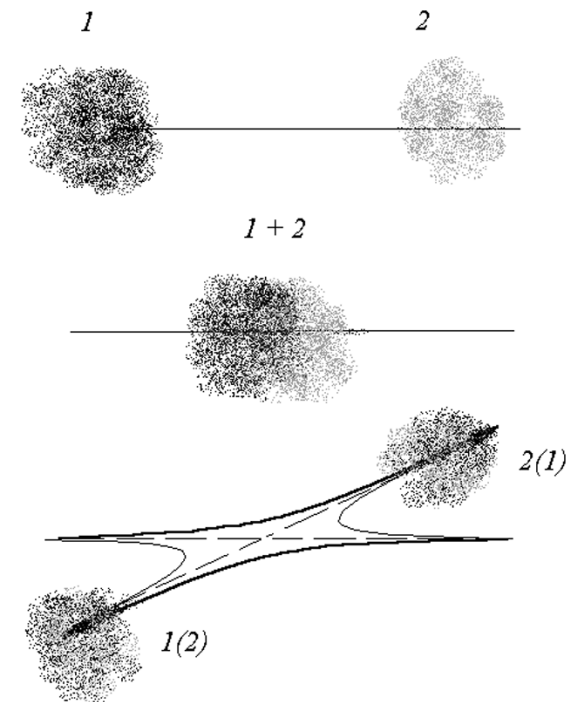
$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) ???$$

Тождественность (неразличимость) микробиъектов



Рассеяние одинаковых классических объектов

$$P_{cl} = P(\theta) + P(\pi - \theta)$$



Рассеяние тождественных квантовых микробиъектов

$$F(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta)$$

$$P_q = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2 \operatorname{Re} f(\theta) f^*(\pi - \theta)$$

Математическая формулировка принципа тождественности

Тождественность: $\psi(\xi_1, \xi_2)$ и $\psi(\xi_2, \xi_1)$ - описывают одно и то же состояние частицы

Введем оператор перестановки $\hat{P}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1)$

В силу тождественности $\psi(\xi_2, \xi_1) = \lambda\psi(\xi_1, \xi_2)$

$$\hat{P}^2\psi(\xi_1, \xi_2) = \lambda\hat{P}\psi(\xi_1, \xi_2) = \lambda^2\psi(\xi_1, \xi_2)$$

$$\hat{P}^2\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_1, \xi_2)$$



$$\lambda = \pm 1$$

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm\psi(\xi_2, \xi_1)$$

Волновая функция должна быть симметричной, либо антисимметричной относительно перестановки двух частиц местами

Важный частный случай: две невзаимодействующие частицы

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2)$$

$\psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)$ - это другое состояние

Симметризованная и антисимметризованная комбинации

$$\psi_S(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) + \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1))$$
$$\psi_A(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1))$$

Перепутанные состояния

$$\psi_S(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) + \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1))$$
$$\psi_A(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1))$$

В случае тождественных частиц (даже не взаимодействующих!!) оказывается невозможной факторизация на одночастичные состояния

Это эффект квантовой запутанности (entanglement states)

Основа современных приложений квантовой механики, таких как квантовые вычисления, квантовая связь, квантовая криптография

Бозоны и фермионы. Принцип Паули

Целый спин $s = 0, 1, 2 \dots$ - волновая функция **симметрична** относительно перестановки частиц местами – бозе-частицы (**бозоны**)

Полуцелый спин $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ - волновая функция **антисимметрична** относительно перестановки частиц местами – ферми-частицы (**фермионы**)

Фермионы: электрон, мюон, протон нейтрон,....

Бозоны: фотон, пионы (π^\pm, π^0), W^\pm, Z^0 - бозоны (кванты переносчики слабого взаимодействия), гравитон (?),...

Спин составной частицы (когда можно ввести?) – ядро, атом, молекула.... –
тоже могут быть бозонами и фермионами

Принцип Паули. Две частицы с полуцелым спином не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии

$$\psi_1(\xi) = \psi_2(\xi) \quad \longrightarrow \quad \psi_A(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\xi_1)\psi_1(\xi_2) - \psi_1(\xi_2)\psi_1(\xi_1)) \equiv 0$$

В атоме не может быть двух электронов, характеризующихся одним и тем же набором квантовых чисел.

Квантовые статистические особенности ансамблей ферми- и бозе-частиц. Макроскопические квантовые эффекты

Электронный газ в металлах Энергия Ферми $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$,
средняя энергия ансамбля при нулевой температуре $\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F$

Сверхпроводимость и сверхтекучесть (в бозе-системах)

Сверхтекучесть – бозе-конденсат (бозоны «любят» находиться в одном квантовом состоянии) (${}^3\text{He}$)₂

Сверхтекучесть в ${}^4\text{He}$ ($T^* = 2.17\text{K}$) и ${}^3\text{He}$ ($T^* = 2.6\text{ mK}$) образование молекулярных комплексов

Сверхпроводимость (1911): теория БКШ и образование куперовских пар (бозонов)

Существование классического электромагнитного поля и невозможность существования классического поля электронов

Многоэлектронные атомы

Одночастичные состояния и атомные оболочки

Электронное состояние	n, ℓ, m_ℓ, m_s	Не может быть повторяющихся наборов квантовых чисел			
гл. кв. число	1	2	3	4	
оболочки	K	L	M	N	
подоболочки	$1s$	$2s, 2p$	$3s, 3p, 3d$	$4s, 4p, 4d, 4f$	
число мест	2	2, 6	2, 6, 10	2, 6, 10, 14	

Атомная оболочка (слой) - совокупность электронов с одинаковым значением главного квантового числа. Число мест $2n^2$

Атомная подоболочка - совокупность электронов в атоме с одинаковыми значениями главного и орбитального квантовых чисел. Число мест $2(2\ell + 1)$

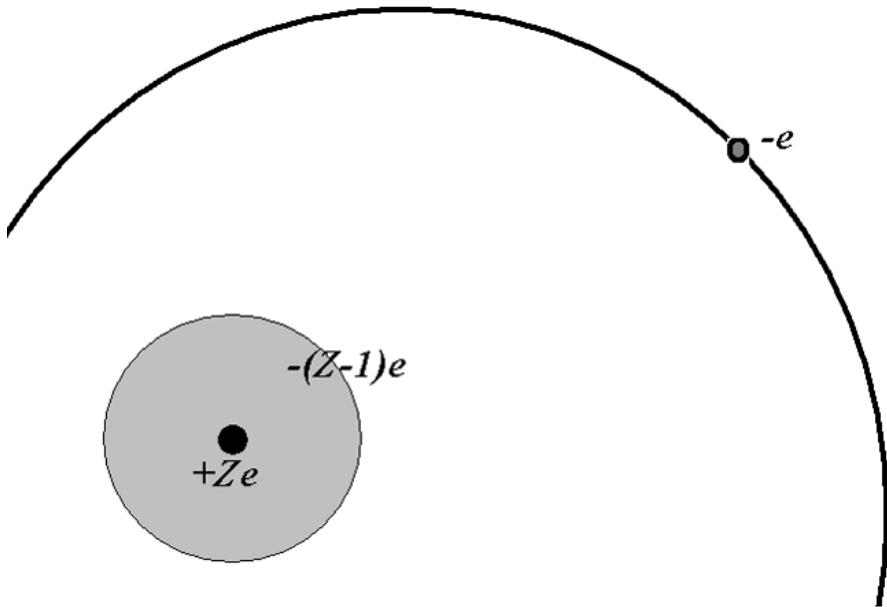
Эквивалентные электроны – электроны, находящиеся в одной и той же подоболочке

Электронная конфигурация – распределение по оболочкам и подоболочкам $n\ell^k$

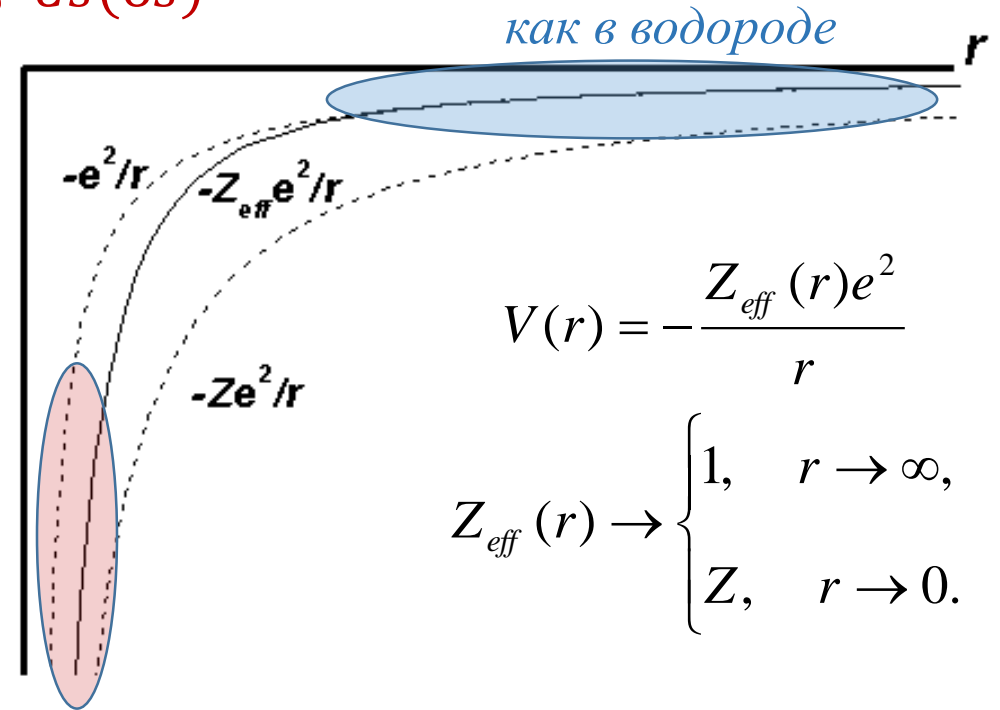
Одноэлектронный многоэлектронный атом

Атом с одним электроном сверх полностью заполненных оболочек и подоболочек
Li ($1s^2 2s$), *B* ($1s^2 2s^2 2p$), *Na* ($1s^2 2s^2 2p^6 3s$), *Al* ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$), ..., *K* (... $4s$), *Rb* (... $5s$), *Cs* ($6s$)

Щелочные металлы *Li* ($2s$), *Na* ($3s$), *K* ($4s$), *Rb* ($5s$), *Cs* ($6s$)



Потенциал глубже – уровни уходят вниз, тем больше, чем меньше орбитальный момент



$$V(r) = -\frac{Z_{\text{eff}}(r)e^2}{r}$$

$$Z_{\text{eff}}(r) \rightarrow \begin{cases} 1, & r \rightarrow \infty, \\ Z, & r \rightarrow 0. \end{cases}$$

Теория возмущений $\delta E_{nl} = \int R_{nl}^2(r) \cdot \delta V(r) r^2 dr$ $\delta V = -(Z_{\text{eff}}(r) - 1)e^2 / r$ $E_{nl} = -\frac{Ry}{(n - \Delta_{n,l})^2}$

Атомы щелочных металлов

Z	Элемент	Δ_s	Δ_p	Δ_d	Δ_f	Потенциал ионизации, эВ
3	Li	0.412*	0.041	0.002	0.000	5.37
11	Na	1.373*	0.883*	0.010	0.001	5.12
19	K	2.230*	1.776*	0.146*	0.007	4.32
37	Rb	3.195*	2.711*	1.233*	0.012	4.16
55	Cs	4.131*	3.649*	2.448*	0.022	3.89

Мы полагали, что суммарные орбитальный и спиновый моменты полностью заполненных подболочек равны нулю

