

СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ РАДИУСА МНОГОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА

д-р физ.-мат. наук, проф. В. В. СКОБЕЛЕВ,

канд. техн. наук, доц. С. В. КОПЫЛОВ

(Московский политехнический университет, Россия)

В работе предложен метод расчета размеров многоэлектронных атомов, который дает результаты, согласующиеся с известными классическими. В этой связи работа представляет, в т. ч., и методический интерес. Указано, что данный метод в перспективе позволяет рассчитать эту же величину для атомов с одномерной и двумерной электронными структурами, которые действительно были получены ранее в экспериментах с другими атомами.

Ключевые слова: многоэлектронный атом, уравнение Томаса-Ферми, средний радиус.

Введение. В классической книге [1] с использованием обычного уравнения Томаса-Ферми [2; 3] в «нашем» пространстве с размерностью $D=3$ и на основании общих соображений было получено, что «внешние границы» многоэлектронного атома не зависят от атомного номера Z . Поскольку этот вывод, как и само квазиклассическое приближение Томаса-Ферми, являются в данном аспекте весьма приближительными, представляет интерес конкретным расчетом оценить размеры многоэлектронного атома, оставаясь в рамках этого приближения Томаса-Ферми.

С этой целью в пункте 1 мы вводим в рассмотрение эффективную «одно-частичную» волновую функцию, характеризующую многоэлектронный атом в целом.

Далее в пункте 2 с использованием обычных методов квантовой механики мы вычисляем среднее значение $\langle \tilde{r} \rangle$ безразмерного радиуса многоэлектронного атома, который в нашей интерпретации и можно трактовать как размер такого атома.

Эффективная волновая функция многоэлектронного атома. В дальнейших рассуждениях мы используем формулу (70.9) книги [1] для электронной концентрации n в многоэлектронном атоме, которая в обычных (а не атомных [1]) единицах имеет вид:

$$n = \frac{Z^2}{r_B^3} \times f\left(\frac{\tilde{r}Z^{1/3}}{b}\right), f(x) = \frac{32}{9\pi^2} \left(\frac{\chi(x)}{x}\right)^{3/2}. \quad (1)$$

Здесь $b \approx 0.885$, $\tilde{r} = r/r_B$, $r_B = \hbar^2 / me^2$ – боровский радиус.

Параметр x выражается через безразмерное расстояние \tilde{r} до ядра

$$x = \frac{\tilde{r}Z^{1/3}}{b}, \quad (2)$$

а функция $\chi(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению Томаса-Ферми (70.7) [1]

$$x^{1/2} \frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \quad (3)$$

с граничными условиями

$$\chi(0) = 1, \chi(\infty) = 0. \quad (3a)$$

Как и в книге [1], мы тоже решили его численно с графическим представлением этой функции $\chi(x)$ на рисунке 1.

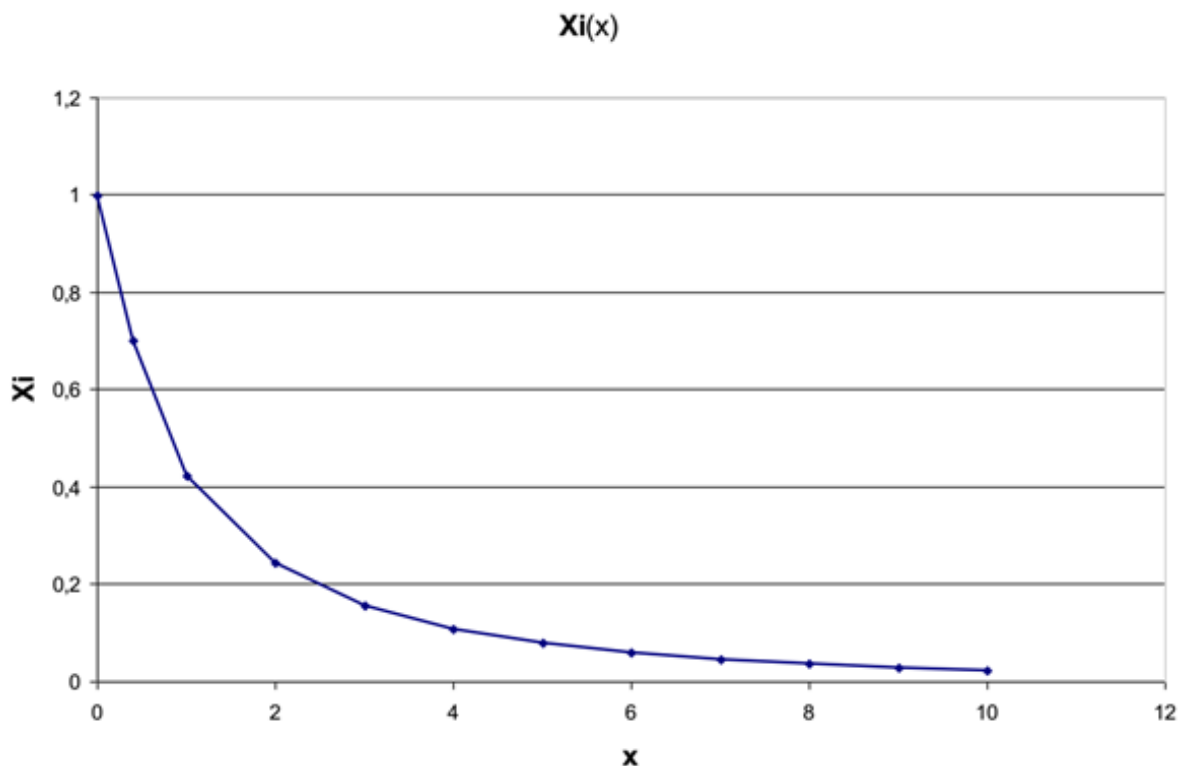


Рисунок 1. – Графическое представление функции Томаса-Ферми $\chi(x)$

Этот рисунок основан на наших численных расчетах и в упрощенном виде воспроизводит рисунок 23 книги [1].

В соответствии с вероятностной трактовкой вводимого нами аналога волновой функции $\Psi_3 \equiv \Psi_3(x)$ в $D=3$ выражению $n(1)$ должна соответствовать

эта функция Ψ_3 , причем $n \sim \Psi_3^2$. Таким образом, при нормировке на единицу значение Ψ_3 определяется выражением

$$\Psi_3 = \left[\frac{n}{\int n dV_3} \right]^{1/2}, \quad (4)$$

где dV_3 – элемент объема в $D=3$, который в силу зависимости n только от r полагаем равным $dV_3 = r^2 dr$ (в безразмерных переменных, можно заменить $dV_3 \rightarrow d\tilde{V}_3 \equiv \tilde{r}^2 d\tilde{r}$). Как можно видеть, функция Ψ_3 , будучи действительной, нормирована обычным условием

$$\int \Psi_3^2 dV_3 = 1, \quad (5)$$

Расчет размеров многоэлектронного атома. Среднее значение радиуса $\langle \vec{r} \rangle_3$ многоэлектронного атома по функциям (4) может быть вычислено в соответствии с обычными положениями квантовой механики [4]:

$$\langle \vec{r} \rangle_3 = \int_{1/Z}^1 \Psi_3^2 \vec{r} \times \tilde{r}^2 d\tilde{r}, \quad (6)$$

причем пределы интегрирования в (6) выбраны с учетом границ применимости приближения Томаса-Ферми [1].

Принимая во внимание представления (1),(4), получаем тогда:

$$\langle \vec{r} \rangle_3 = \frac{1}{N_3} \int_{1/Z}^1 \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)^{3/2} \tilde{r}^3 d\tilde{r}, \quad (7)$$

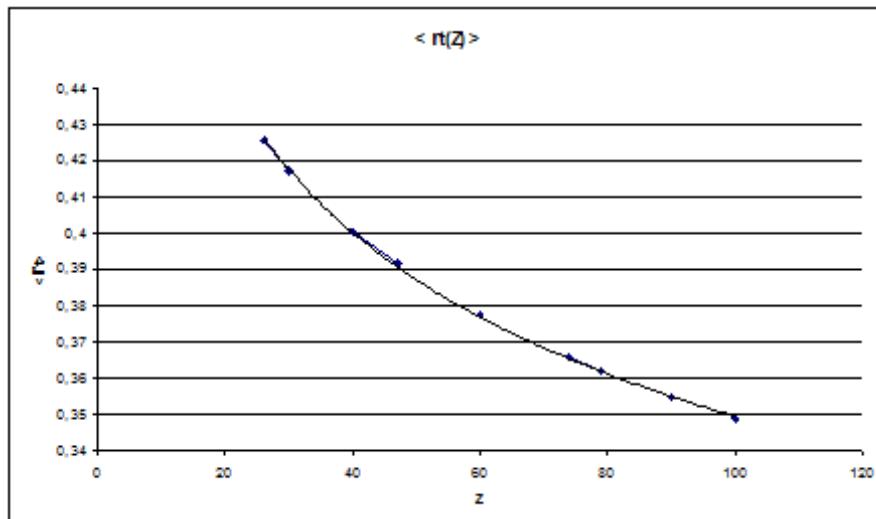
$$N_3 = \int_{1/Z}^1 \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)^{3/2} \tilde{r}^2 d\tilde{r}, \quad (7a)$$

Удобно в (7),(7a) перейти к интегрированию по x :

$$\langle \vec{r} \rangle_3 = \frac{1}{\tilde{N}_3} \frac{b}{Z^{1/3}} \int_{1/(bZ^{2/3})}^{Z^{1/3}/b} \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)^{3/2} x^3 dx, \quad (8)$$

$$\tilde{N}_3 = \int_{1/(bZ^{2/3})}^{Z^{1/3}/b} \left(\frac{\chi(x)}{x} \right)^{3/2} x^2 dx. \quad (8a)$$

Вычисляемое по формулам (7) или (8) с учетом (2), (7a) или (8a) значение $\langle \vec{r} \rangle_3$, вообще говоря, может зависеть от Z . Результат численного расчета представлен на рисунке 2.



Рисунке 2. – Зависимость среднего значения $\langle \vec{r} \rangle_3 \equiv \langle \vec{r} \rangle_3$ радиуса многоэлектронного атома от атомного номера Z , рассчитанная по формулам (7), (8)

Как видно из рисунка 2, имеет место некоторое незначительное уменьшение $\langle \vec{r} \rangle_3$ с увеличением Z , по крайней мере, в диапазоне $Z \in \{25 \div 100\}$ на рисунке 2, обусловленное в основном наличием фактора $b / Z^{1/3}$ в (8).

Отметим еще раз, что в классическом основанном на общих соображениях подходе [1] к интерпретации размеров многоэлектронных атомов их границы вообще не зависят от Z .

Поскольку эффект убывания в указанном диапазоне является малым (от $\langle \vec{r} \rangle_3 \approx 0.4$ до $\langle \vec{r} \rangle_3 \approx 0.35$, а для характерных значений $Z = 26(Fe)$, $47(Ag)$, $74(W)$, $79(Au)$ еще меньше, то можно считать, что в этот наш результат согласуется с классическим [1], в котором внешние границы атома не зависят от Z .

Стоит, однако, заметить, что в [1] эти границы определяются из условия $\tilde{r} \sim 1$, в то время как в нашей трактовке $\tilde{r} \sim \langle \vec{r} \rangle_3$, т. е. при том же порядке величины, строго говоря, примерно в два раза меньше. Поскольку и сам метод Томаса-Ферми является принципиально приближенным, то это различие в его рамках несущественно.

Заметим также, что с формальной точки зрения введенную нами функцию Ψ_3 следовало бы именовать эффективной “одно-частичной” волновой функцией, как на это и было указано во введении, поскольку нам не удалось установить вид

“уравнения Шредингера”, которому она удовлетворяет. В смысле терминологии, вероятно, корректней было бы использовать функцию распределения f_3 электронов по расстоянию до ядра, равную

$$f_3 = \Psi_3^2 \tilde{r}^2 \quad (9)$$

с нормировкой

$$\int_{1/Z}^1 f_3 d\tilde{r} = 1. \quad (10)$$

В этом случае в выражении $\langle \tilde{r} \rangle_3$ через f_3 имеем вместо (6)

$$\langle \tilde{r} \rangle_3 = \int_{1/Z}^1 f_3 \tilde{r} d\tilde{r} \quad (11)$$

с тем же, разумеется, результатом на рисунке 2.

Заключение. Таким образом, предложенный нами метод расчета размера многоэлектронных атомов, основанный в конечном счете на квазиклассическом приближении Томаса-Ферми, а также на общих принципах квантовой механики, позволяет независимым от подхода авторов классической книги [1] оценить размеры таких атомов, причем наши и полученные в [1] оценки этих размеров оказываются достаточно близкими.

Наш подход к проблеме, по крайней мере, дополняет материал этой книги [1] и, во всяком случае, имеет методическое значение.

Представляет интерес пролонгировать наш метод на одномерные и двумерные атомы, которые были получены в экспериментах [5–8] для других атомов, с перспективой экспериментальной проверки адекватности нашего подхода и в данной ситуации.

В этом случае следует использовать результаты одного из авторов, в работах [9; 10] которого было решено уравнение Томаса-Ферми для одномерных и двумерных атомов (при этом в формуле (20) [10] по сравнению с (10а) [9] допущена неточность в численном коэффициенте; эти формулы, однако, не имеют отношения к данной работе). Эти расчеты мы планируем проделать в дальнейшем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика, Т. 3, Квантовая механика, Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лившиц – М. : Наука, 1974. – 752с.
2. Thomas, L. H. The calculation of atomic fields / L. H. Thomas // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. – 1927. – 23(5). – P. 542–548.
3. Fermi, E. Un Metodo Statistico per la Determinazione di alcune Prioprietà dell’Atomo / E. Fermi // Endiconti: Accademia Nazionale dei Lincei. – 1927. – № 6. – P. 602–607.

4. Соколов, А. А. Квантовая механика / А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов // М. : Просвещение, 1965. – 591 с.
5. Eichmann, U. Positional correlation in laser-excited three-body Coulomb systems / U. Eichmann, V. Lange, W. Sandner // Phys. Rev. Lett. – 1990. – № 64(3). – P. 274–277.
6. A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle / Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions // Phys. Rev. Lett. – 2001. – № 87(130402).
7. Rychtarik, D. Two-Dimensional Bose-Einstein Condensate in an Optical Surface Trap / D. Rychtarik, B. Engeser, H.-C. Nägerl, R. Grimm // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 92(173003).
8. Krüger, P. Critical Point of an Interacting Two-Dimensional Atomic Bose Gas / P. Krüger, Z. Hadzibabic, J. Dalibard // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol. 99(040402).
9. Скобелев, В. В. К вопросу о существовании "одномерных" многоэлектронных атомов / В. В. Скобелев // Известия ВУЗов. Физика. – 2017. – Т. 60, № 9. – С. 32–36.
10. Скобелев, В. В. Существуют ли «двумерные» и «одномерные» многоэлектронные атомы? / В. В. Скобелев // ЖЭТФ, 2018. – Т. 153, № 5. – С. 776–781.