Б.К. Новосадов

Аналитическая механика атома

Москва
«Книга по Требованию»

УДК 53
ББК 22.3
Б11

Б.К. Новосадов
Б11 Аналитическая механика атома / Б.К. Новосадов – М.: Книга по Требованию, 2014. – 322 с.

ISBN 978-5-519-01845-6

Книга рассчитана на специалистов в области математической физики и квантовой механики, физиков-теоретиков, преподавателей, а также будет полезна аспирантам и студентам старших курсов физико-технических факультетов вузов, может служить пособием при проведении спецкурсов по теории атома.

ISBN 978-5-519-01845-6

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие

Предлагаемая вниманию читателя монография «Аналитическая механика атома» посвящена уравнениям квантовой механики атома и математической физике строения атома. Поистине неисчерпаема тема данного исследования. Согласно Э. Уиттекеру, предметом аналитической механики является изучение движения материальных тел, вызванного их взаимодействием, средствами математического анализа. С появлением волновой механики микрочастиц математическая физика обогатилась новыми уравнениями в частных производных, исследование которых помогает глубже понять атомное строение вещества и прогнозировать его физико-химические свойства. Прошло сто лет со времени создания Нильсом Бором (1913 г.) первой квантовой теории атома. Последующее развитие атомной теории привело к открытию волнового уравнения Шрёдингера и релятивистского уравнения Дирака для электрона, которые составляют основу современной квантовой механики атомов и молекул. По существу в теоретической физике была поставлена и решена обратная спектральная задача: по наблюдаемым оптическим спектрам атомов и молекул найти физические модели и соответствующие им уравнения для расчета спектров. В механике, как известно, уравнения Ньютона также явились решением обратной задачи: по видимым траекториям планет определить закон силы взаимодействия частиц. Однако сложность коэффициентов волновых уравнений оказалась препятствием к созданию методов их анализа.

Основными математическими моделями до сих пор служат одночастичные приближения, к которым относится метод Хартри–Фока и многоконфигурационные варианты расчетных схем. Прогнозирование физико-химических свойств тяжелых элементов нуждается в развитии релятивистской квантовой теории многих частиц. В теории атома до сих пор остается неисследованной многоэлектронная природа периодичности химических свойств элементов, которая в современных учебниках фактически объясняется на основе экспериментальной спектрохимической информации. К этому ряду относится также адекватное объяснение слоистого строения электронной оболочки атома, которое физически обусловлено взаимным отталкиванием электронов, в то время как в рамках одночастичных приближений при решении волновых уравнений физика самоорганизации электронного строения атома постулируется и моделируется с помощью принципов статистики. Огромный архив атомной спектроскопии нуждается в содержательной физической интерпретации проявлений характера коллективных движений электронов в атомах и ионах и, в сущности, позволяет понять и продемонстрировать физическую природу явлений в микромире вполне доступными средствами математического анализа и моделирования.

Автор поставил своей целью развитие многоэлектронных методов анализа уравнения Шрёдингера для атома и сделал попытку сформулировать релятивистскую квантовую механику многих частиц как на основе клиффордова матричного представления, так и с применением гиперкомплексных пространств для частиц. Анализ подобных уравнений позволяет содержательно интерпретировать оптические спектры и физико-химические свойства тяжелых элементов. Также для системы многих частиц была решена задача выделения в гамильтониане кинетического момента и дан метод решения уравнения с оператором квадрата кинетического момента. Таким образом, для замкнутой системы частиц имеется возможность решать уравнение Шрёдингера при заданном полном кинетическом моменте. Даны новые конструктивные методы решения уравнения Шрёдингера и релятивистских уравнений для атома, как в координатном, так и в импульсном представлении. Проведены асимптотические оценки спектров атомов и их ионов. Изложение начинается с обсуждения классической аналитической механики частиц, что позволяет перейти от соотношений между классическими понятиями импульса и энергии к квантовым представлениям в предположении, что эти соотношения для свободных частиц остаются неизменными по форме, но отвечают согласно волновой модели задаче на собственные значения энергии частиц. Тогда естественно осуществить поиск уравнения в частных производных для описания оптических спектров атома, что непосредственно приводит к волновой картине в теории. Трудность первоначального освоения квантовой механики и ее математических методов как раз связана с непривычностью физики микрочастиц с позиций классической механики и с желанием понять движение электронов в атоме в рамках аналитической динамики Ньютона–Лагранжа. Освоение лазерной электроники инженерами побуждает их обратиться к теоретическим основам новой техники и квантовой физики, что предъявляет требования к методической стороне изложения трудных вопросов современной квантовой теории. На повестке дня стоит разработка новых конструктивных математических методов решения задач в теории многих частиц и их использование в инженерных проектах.

Книга рассчитана на специалистов в области математической физики и квантовой механики, физиков-теоретиков, преподавателей, а также будет полезна аспирантам и студентам старших курсов физико-технических факультетов вузов, может служить пособием при проведении спецкурсов по теории атома.

Часть первая. Классическая механика частиц

Глава 1. Теория кинетического момента системы частиц

1. Определение кинетического момента

Кинетический момент служит важнейшей физической величиной, являясь характеристикой вращательного движения системы частиц. Изолированная или подверженная действию центральной силы система частиц подчиняется закону сохранения кинетического момента. По определению кинетический момент системы равен сумме кинетических моментов отдельных частиц

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{N} \left[\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i \right]. \tag{1.1}$$

Векторное произведение в формуле (1.1) раскрывается в виде символического детерминанта

$$\mathbf{L}_i = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x_i & y_i & z_i \\ p_{xi} & p_{yi} & p_{zi} \end{vmatrix}, \tag{1.2}$$

где $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ – орты декартовой лабораторной системы координат. Вычислим квадрат кинетического момента системы частиц

$$\mathbf{L}^2 = \left(\sum_{i=1}^{N} \left[\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i \right] \right)^2 .$$

Имеем

$$\mathbf{L}^2 = \sum_{i=1}^{N} \left([\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i] \right)^2 + \sum_{i\neq}^{N} \sum_{j=1}^{N} [\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i] \cdot [\mathbf{r}_j \mathbf{p}_j]. \tag{1.3}$$

Произведение векторных произведений может быть преобразовано к скалярным произведениям векторов с помощью формулы Лагранжа

$$[\mathbf{ab}][\mathbf{cd}] = (\mathbf{ac})(\mathbf{bd}) - (\mathbf{ad})(\mathbf{bc}). \tag{1.4}$$

В результате получим выражение

$$\mathbf{L}^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\mathbf{r}_i^2 \mathbf{p}_i^2 - (\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i)^2 \right) + \sum_{i\neq}^{N} \sum_{j=1}^{N} \left((\mathbf{r}_i \mathbf{r}_j)(\mathbf{p}_i \mathbf{p}_j) - (\mathbf{r}_i \mathbf{p}_j)(\mathbf{r}_j \mathbf{p}_i) \right). \tag{1.5}$$

Рассмотрим данную формулу. В первой сумме скалярное произведение радиус-вектора на импульс представляет собой радиальный импульс, во второй сумме аналогичное скалярное произведение дает проекции импульсов на другие радиус-векторы. Скалярное произведение радиус-векторов пропорционально косинусу угла между этими векторами. Располагая начало системы координат в центре масс, можно свести исследование движения системы частиц лишь к определению внутренних движений, не нарушающих закон сохранения кинетического момента замкнутой системы частиц. Очевидно, обращение в нуль момента свидетельствует об остановке вращения системы как целого. Однако это не означает, что отдельные частицы системы не совершают вращательные движения относительно центра масс.