

Многоэлектронные атомы. Принцип неразличимости тождественных частиц. Понятия о квантовой статистике Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Фермионы. Бозоны. Принцип Паули.



Многоэлектронные атомы

Уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов практически неразрешимы (по крайней мере, это очень сложный процесс). Какие же причины возникновения такой ситуации? Допустим у нас есть атом, состоящий из ядра с зарядом Z и $N=Z$ электронов. Гамильтониан, соответствующий такому атому, если мы пренебрежем движением ядра, представляет собой сумму:

1) кинетических энергий всех электронов

$$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{i=Z} \Delta_i$$

2) потенциальной энергии взаимодействия

$$-Z \sum_i \frac{1}{r_i}$$

где r_i - расстояние i -го электрона от ядра



3) потенциальной энергии взаимодействия электронов друг с другом:

$$\frac{1}{2} \sum_j \sum_i \frac{1}{r_{ji}}$$

где r_{ij} - расстояние электронов друг от друга

При суммировании мы учитываем каждый электрон два раза, поэтому сумма делится на 2. Следовательно, уравнение Шредингера запишется для атома с Z электронами таким образом

$$H\psi = \left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{i=Z} \Delta_i - Z \sum_i \frac{1}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_j \sum_i \frac{1}{r_{ji}} \right] \psi$$

Если бы можно было пренебречь взаимодействием электронов, то выражение юы приняло вид:



$$H\psi = \sum_{i=1}^{i=Z} \left[-\frac{1}{2} \Delta_i + \frac{Z}{r_i} \right] \psi$$

Это невозмущенное (если рассматривать взаимодействие электронов как возмущение) уравнение решается методом разделения переменных, поскольку его можно записать в виде суммы «водородо-подобных» уравнений, каждое из которых зависит только от координат одного из электронов. Решение уравнения представит собой произведение водородоподобных функций ψ_i для отдельных электронов.

$$\psi = \prod_i \psi_i$$

Однако такое приближение будет тем хуже, чем больше электронов в атоме.

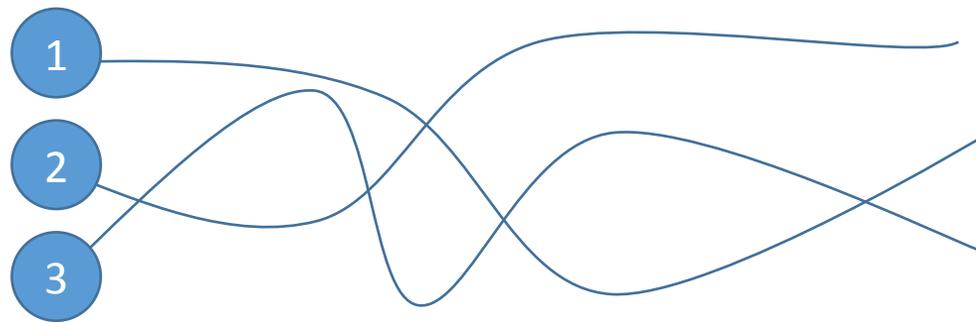


Это потому, что отброшенная нами потенциальная энергия взаимодействия возрастает пропорционально $\frac{Z(Z-1)}{2}$, в то время как энергия взаимодействия электронов с ядром пропорциональна их числу Z . Если не учитывать различия в расстояниях электронов от ядра и друг друга, то энергия их взаимодействия пропорциональна $\frac{Z(Z-1)}{2}$, а энергия взаимодействия с ядром Z^2 . Отношение этих величин равно и заключено в пределах от

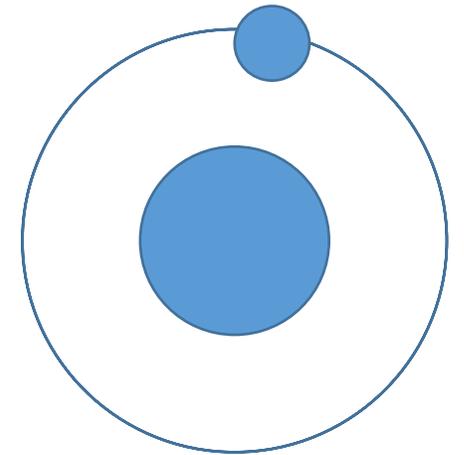
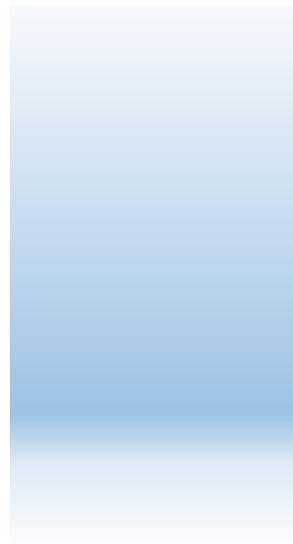
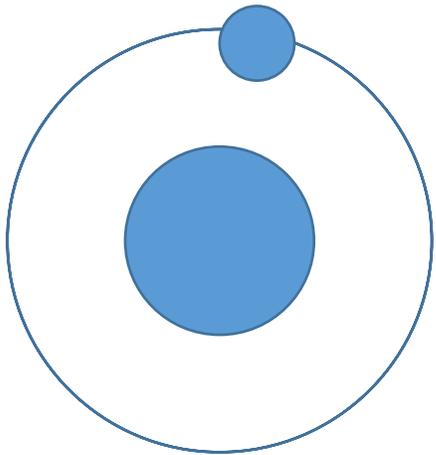


Принцип неразличимости тождественных частиц.

Частицы, описываемые классической механикой не являются неразличимыми, даже если они тождественны между собой. Пронумеруем частицы в начальном состоянии, если при перемещении в пространстве они окажутся в других точках, мы сможем точно определить где находится каждая из частиц. Это происходит благодаря тому, что частицы движутся по траектории.



Но в квантовой механике понятия траектория не существует. Это очень сильно влияет на описание свойств системы с микрочастицами. Допустим, что мы смогли пронумеровать в начальном состоянии частицы, но после, понять кто из них какой номер, принципиально невозможно. Например, при сближении двух атомов водорода велика вероятность оказаться в некоторой области пространства любого из электронов, принадлежащих вначале разным атомам.



- Таким образом, утверждение о том, что одинаковые микрочастицы принципиально неразличимы и составляет принцип неразличимости одинаковых частиц. Данный принцип проявляется в неизменности свойств системы при перестановки пары частиц. Волновая функция может принимать два значения $\Psi(r_1, r_2) = \Psi(r_2, r_1)$ или $\Psi(r_1, r_2) = -\Psi(r_2, r_1)$. То есть функция системы двух частиц, при их перестановке или неизменна (симметричные функции) или меняет знак на противоположный (антисимметричные функции).

Частицы, свойства которых описываются симметричными функциями (к ним относятся мезоны, фотоны, атомные ядра, состоящие из четного числа нуклонов и др.) называются частицами, подчиняющимися статистике Бозе-Эйнштейна, или бозонами. Антисимметричными функциями описываются частицы, подчиняющиеся статистике Ферма-Дирака (к ним относятся электроны, позитроны, протоны, нейтроны, нейтрино и др.).



Понятия о квантовой статистике Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака.

Важнейшим объектом изучения квантовой статистики, является идеальный газ. Потому, что во многих случаях реальную систему можно считать идеальным газом. Числа заполнения N_i – числа, указывающие степень заполнения квантового состояния частицами системы, состоящей из множества тождественных частиц. Данными числами задается состояние системы невзаимодействующих частиц. Например, для систем частиц, образованных бозонами, числа заполнения могут принимать любые целые значения. Для систем частиц, образованных фермионами, числа заполнения могут принимать только два значения 0 или 1. обязательно сумма всех чисел заполнения должна быть равна числу частиц системы.

Именно квантовая статистика позволяет подсчитать среднее число частиц в данном квантовом состоянии.



Бозе-газ – это идеальный газ из бозонов, описывается квантовой Статистикой Бозе-Эйнштейна.

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/(kT)} - 1}$$

Данное равенство называется распределением Бозе-Эйнштейна.

$\langle N_i \rangle$ - это среднее число бозонов в квантовом состоянии с энергией

E_i , k – постоянная Больцмана

T - термодинамическая температура

μ - химический потенциал



m не зависит от энергии, а определяется только температурой и плотностью числа частиц. Химический потенциал находится обычно из условия, что сумма всех $\langle N_i \rangle$ равна полному числу частиц в системе. Здесь $m \geq 0$, так как иначе среднее число частиц в данном квантовом состоянии отрицательно, что не имеет физического смысла. Он определяет изменение внутренней энергии системы при добавлении к ней одной частицы при условии, что все остальные величины, от которых зависит внутренняя энергия (энтропия, объем), фиксированы.



Ферми-газ – это газ, описываемый квантовой статистикой Ферми-Дирака.

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/(kT)} - 1}$$

Данное равенство называется распределением Ферми-Дирака.

Заметим, в отличие от распределения Бозе-Эйнштейна n может иметь положительное значение (это не приводит к отрицательным значениям чисел $\langle N_i \rangle$).

Также, если $e^{(E_i - \mu)/(kT)} \gg 1$, то распределение Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака переходят в классическое распределение Максвелла-Больцмана.

$$\langle N_i \rangle = A e^{-E_i/(kT)}$$

где $A = e^{(\mu)/(kT)}$



Таким образом, при высоких температурах оба «квантовых» газа ведут себя подобно классическому газу.

Система частиц называется **вырожденной**, если ее свойства существенным образом отличаются от свойств систем, подчиняющихся классической статистике. Поведение как бозе-газа, так и ферми-газа отличается от классического газа, они являются вырожденными газами. Вырождение газов становится существенным при весьма низких температурах и больших плотностях.

Параметром вырождения называется величина A . При $A \ll 1$, т. е. при малой степени вырождения, распределения Бозе — Эйнштейна и Ферми — Дирака переходят в классическое распределение Максвелла — Больцмана.

Температурой вырождения T_0 называется температура, ниже которой отчетливо проявляются квантовые свойства идеального газа, обусловленные тождественностью частиц, т. е. T_0 — температура, при которой вырождение становится существенным. Если $T \gg T_0$, то поведение системы частиц (газа) описывается классическими законами.



В физике микромира все частицы делятся на два класса: фермионы и бозоны. Они различаются значением спина. Спином называется минимальное значение момента импульса, которое может иметь частица. Спин и другие моменты импульсов измеряются в единицах \hbar .



Бозоны

Бозоны – частицы с целым или нулевым значением спина. Такой термин предложил физик Поль Адриен Морис Дира́к. Они подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, что позволяет находиться в одном квантовом состоянии неограниченное количество одинаковых частиц. Бозоны бывают элементарные и составными.

Элементарные бозоны являются квантами калибровочных полей, с помощью которых происходит взаимодействие элементарных фермионов (лептонов и кварков) в Стандартной модели. К ним относятся:

1. Фотон
2. Глюон
3. W^{\pm} и Z -бозоны



Также к элементарным относится бозон Хиггса. Составные бозоны – многочисленные двухкварковые связанные состояния (мезоны).

Некоторые бозоны

Название	Заряд	Спин	Масса	Переносимое взаимодействие
Фотон	0	1	0	Электромагнитное взаимодействие
		1	80.4	Слабое взаимодействие
	0	1	91.2	Слабое взаимодействие
Глюон	0	1	0	Сильное взаимодействие
Бозон Хиггса	0	0		Поле Хиггса



Фотон- квант электромагнитного излучения, элементарная частица. Не имеет массы, способная существовать в вакууме только двигаясь со скоростью света. Электрический заряд равен 0. В физике обозначается буквой γ .

W - и Z -бозоны – элементарные частицы, являются переносчиками слабого взаимодействия.

Глюоны - элементарные частицы, переносчики сильного взаимодействия, а так же его непосредственные участники. Векторные калибровочные бозоны, отвечающие за сильное цветное взаимодействие между кварками в квантовой хромодинамике.

Бозон Хиггса – бозон, квант поля Хиггса. Отвечает за инертную массу элементарных частиц. По построению является скалярной частицей (обладает нулевым спином).



Фермионы

В свою очередь фермион – частица с полуцелым значением спина. Названы в честь Энрико Ферми. Фермионами являются: кварки, лептоны, дырки. Фермионы подчиняются статистике Ферми-Дирака, то есть в одном квантовом состоянии может находиться не более одной частицы (принцип Паули). Волновая функция системы одинаковых фермионов антисимметрична относительно перестановки двух любых фермионов. Квантовая система, состоящая из нечётного числа фермионов, сама является фермионом.

12 ароматов элементарных фермионов существует согласно Стандартной модели: 6 кварков и 6 лептонов.

Кварки участвуют в сильном взаимодействии. Абсолютно все кварки имеют электрический заряд, кратный $1/3$ элементарного заряда. Лептоны наоборот – не участвуют в сильном взаимодействии.



Кварки

Поколение	Кварки с зарядом $(+2/3)e$			Кварки с зарядом $(-1/3)e$		
	Название	Символ	Масса	Название	Символ	Масса
1	u-кварк		От 1.5 до 3	d-кварки		
2	s-кварк			s-кварки		
3	t-кварк			b-кварки		

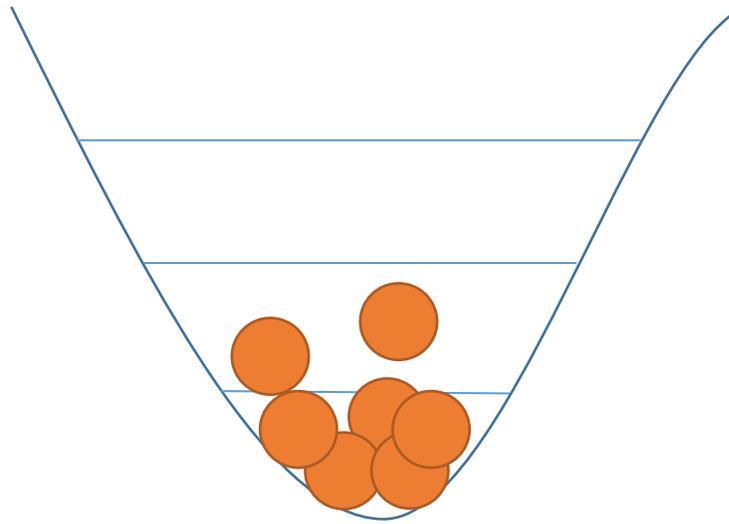


Лептоны

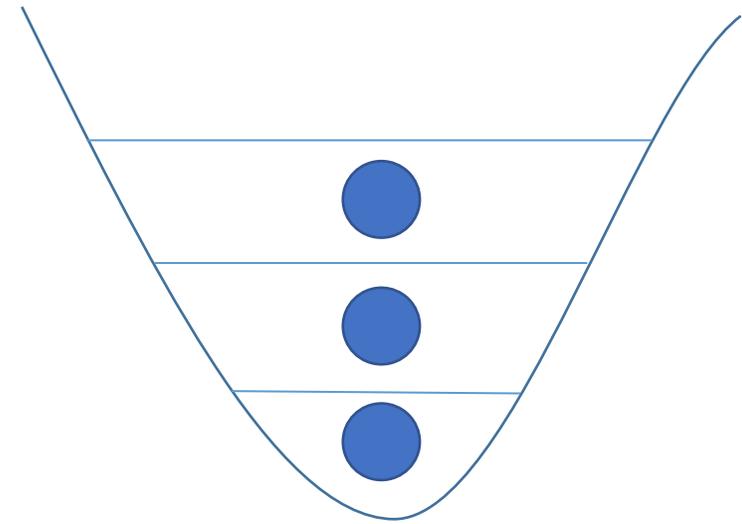
Поколение	Кварки с зарядом (+2/3)e				Кварки с зарядом (-1/3)e			
	Название	Символ	Электрический заряд	Масса	Название	Символ	Электрический заряд	Масса
1	Электрон		-1/+1	0.511	Электронное нейтрино		0	$< 22 \cdot 10^{-7}$
2	Мюон		-1/+1	105.66	Мюонное нейтрино		0	< 0.17
3	Тау-лептон		-1/+1	1776.99	Тау-нейтрино		0	< 15.5



Частицы, подчиняющиеся статистике Ферми–Дирака (фермионы с полуцелым спином) и Бозе–Эйнштейна (бозоны с целым спином). В энергетическом колодце все бозоны могут занимать один и тот же нижний энергетический уровень, образуя конденсат Бозе–Эйнштейна. Фермионы же подчиняются принципу запрета Паули, и поэтому две частицы с одинаковыми квантовыми числами (в частности, однонаправленными спинами) не могут занимать один и тот же энергетический уровень.



Бозон
ы



Фермион
ы