Вычисление с помощью частиц вакуума полной энергии многоэлектронного атома и ядра

Салосин Е.Г.
e-mail salosinevgeniy@rambler.ru

Используя энергию частиц вакуума и равенство нулю его градиента вычислена энергия водородоподобного атома и многоэлектронного атома. Преимущество проведенных расчетов состоит в том, что не нужно учитывать экранировку и взаимодействие электронов, вся система определяется из частиц вакуума как из единого целого. Удалось вычислить энергию многоэлектронного атома и водородоподобного атома. Таки вычислив энергию одного электрона в атоме, для вычисления полной энергии, энергию одного атома надо умножить на количество равноправных образований – электронов. Это преимущество вычисления энергии частиц вакуума. К сожалению, я использовал для проверки формулы полной энергии атома только одно значение – атом гелия, приведенное в книге ЛЛ3, других значений полной энергии я не нашел. По свойствам частиц вакуума вычислена энергия на единицу массы ядерного и атомного взрыва. Оценивалась степень формулы для полной энергии дейтерия и урана по энергии на единицу массы из свойств частиц вакуума, т.е. водородной и атомной бомбы. Получена формула для степени формулы энергии ядра через квантовые числа, т.е. ядро описано полностью.

Опишем кристаллическую структуру твердой элементарной частицы

$$\sum_{k=-N}^{N} exp(-\frac{Zr_{kp}}{n^2a_0}) \cdot$$

$$\cdot \{-\frac{2Z\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_p)(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_m)}{n^2a_0[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^2}$$

$$-\frac{4\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_p)(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_m)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^3} +$$

$$+[\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mp}\left(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_m\right)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^2}$$

$$+\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mk}\,(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^2}]\}\boldsymbol{d}_m=0$$

Величина энергии диполя равна

$$E=\frac{e^2}{d_0}\frac{(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_m)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^2}$$

Если рассматривать решение уравнения общего вида, то определятся значения $\mathbf{d}_P=\mathbf{d}_P(p,k_{-N},...k_N),k_n=n$ при целых значениях p,k. Будет выделено счетное количество направлений $\mathbf{d}_p$, вдоль которых имеется дискретная структура. Дефекты в кристалле связаны с соотношением неопределенности, когда невозможно определить координату частицы. Запишем систему нелинейных уравнения

$$\sum_{m=-N}^{N}A_{pm}\boldsymbol{d}_{m\alpha}=0$$

Эта система нелинейных уравнений имеет $2N+1$ разных комплексных значений $\mathbf{d}_m$. Имеем $3N^2$ значений $\boldsymbol{d}_{m\alpha}=\boldsymbol{d}^*_{-m-\alpha},\boldsymbol{G}_\alpha=\boldsymbol{G}^*_{-\alpha}m=1,\dots,N;\alpha=1,\dots,L$. На самом деле имеем не сумму, а интеграл по α и значение собственных чисел и векторов определяется размерностью L$;N=L$. Т.е. сумму надо свести к L элементов. Подстановка значения параметров для атома водорода для одного электрона приводит $N=L=0$ к значению плеча диполя $d_0=-2n^2a_0/\mathrm{Z}$ и значение полной энергии для водородоподобных атомов $E_n=\frac{e^2}{d}\frac{(r,d)(r,d)}{r^4}=-\frac{Ze^2}{2n^2a_0}=-\frac{Zm_ee^4}{2n^2\hbar^2}$.

Для многоэлектронных атомов надо определять значение $\boldsymbol{G}_\alpha$, используя вычисленное значение диаметра $d_0=-2n^2a_0/\mathrm{Z}$ у водородоподобных атомов. Для многоэлектронных атомов надо использовать формулы

$$\sum_{k=-N}^{N}exp(-\frac{Zr_{kp}}{n^2a_0})\cdot$$

$$\cdot\ \{-\frac{Z\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_m)}{n^2a_0[(\sum_{s=p}^{m}\quad\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^{5/2}}$$

$$-\frac{4\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_m)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^3}-$$

$$+[\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mp}\left(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_m\right)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^2}$$

$$+\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mk}\,(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^2}]\}\boldsymbol{d}_m=0$$

Величина энергии диполя равна

$$E=\frac{e^2}{d_0}\frac{(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_m)}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^2}$$

Начальное приближение значения определителя определяется при условии $(\boldsymbol{d}_p,\boldsymbol{d}_k)=d_0^2\delta_{pk}$. Из равенства нулю определителя определяем постоянную составляющую кристаллической решетки $\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha, p=-N,\dots,N$. Уравнение для атомов гелия имеет вид $p=-1.0,1, m=-1,0,1; m>p$

Матрица для атомов гелия имеет вид. Надо приравнять этот определитель нулю

$$\|A_{pm}\|=\begin{Vmatrix}A_{-1,-1} & A_{-1,0} & A_{-1,1}\\ 0 & A_{00} & A_{01}\\ 0 & 0 & A_{11}\end{Vmatrix}$$

Равенство нулю этого определителя определяется тремя уравнениями $A_{pp}=0$ и сводится к формуле $d_0/\boldsymbol{G}_\alpha=\frac{1+P_n}{4P_n}$.

$$A_{pm}=-\frac{Z(\boldsymbol{G}_\alpha,d_0)^2P_n^2}{n^2a_0 0.5^3(\boldsymbol{G}_\alpha)^5}-\frac{4(\boldsymbol{G}_\alpha,d_0)^2P_n^2}{0.5^4(\boldsymbol{G}_\alpha)^6}+\frac{2(\boldsymbol{G}_\alpha,d_0)P_n}{0.5^3(\boldsymbol{G}_\alpha)^4}=$$

$$= -\frac{8Zd_0^2P_n^2}{n^2a_0G_\alpha^3} - \frac{16\cdot 4d_0^2P_n^2}{G_\alpha^4} + \frac{16d_0P_n}{G_\alpha^3} = \frac{8d_0P_n}{G_\alpha^3}\left(-\frac{Zd_0P_n}{n^2a_0} - \frac{8d_0P_n}{G_\alpha} + 2\right) = 0; \frac{d_0}{G_\alpha}$$

$$= \frac{1+P_n}{4P_n}; P_n = \frac{2^{0.5}}{(2n+1)^{0.5}} = \sqrt{\int_{-1}^{1} P_n^2(x)dx}$$

При этом полная энергия атома стремится к энергии многоэлектронного атома и формулу надо дополнительно умножить на Z (в случае образования электронов из частиц вакуума и расчета энергии частиц вакуума такая процедура законная)

$$E_n = -\frac{Z^2m_ee^4d_0^2}{2n^2\hbar^2 0.5^2G_\alpha^3} = -\frac{Z^2m_ee^4(1+P_n)^2}{8n^2\hbar^2P_n^2} = 2.47 \text{ат. ед.}$$

При экспериментальном значении 2.9 ат. ед. Точность вычисления полной энергии атома гелия из общей формулы для всех многоэлектронных атомов 14%. Но водородоподобные атомы этой формулой не описываются, этой формулой описываются многоэлектронные атомы.

В случае описания ядра атома водорода, имеющего один протон, изменится только коэффициент. Тут необходимо сказать, что использование частиц вакуума ликвидирует зависимость от спина и орбитального момента, а сводится к мультиполям, произвольной степени, которую выбираем для согласия с экспериментом.

$$\sum_{k=-N}^{N} exp(-\frac{Zr_{kp}}{n^2a_0})\ \{-\frac{Z\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_p)^u}{n^2a_0[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^u}$$

$$-\frac{14\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_p)^u}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^{(2u+1)/2}} -$$

$$+[\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mp}\left(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_m\right)^{u-0.5}}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^u}$$

$$+\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mk}\,(\sum_{s=k}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, (\sum_{s=k}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha, \boldsymbol{d}_m)^{u-0.5}}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s + |m-p|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^u}]\}\boldsymbol{d}_m = 0$$

Получается $d_0 = -12n^2a_0/Z$

$$E_n = \frac{e^2ml_\gamma^u}{d_0m_\gamma d_0^u}\frac{(r,d)^7}{r^{14}} = \frac{m_pc^2d_0^u}{d_0^u} = m_pc^2;$$

Вычислим энергию много нуклонного ядра с определяемым показателем степени u.

$$\sum_{k=-N}^{N} exp(-\frac{r_{kp}}{n^2 a_0})\ \{-\frac{\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)^u}{n^2 a_0[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^u}$$

$$-\frac{2u\sum_{m=p}^{k}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)^u}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^{(2u+1)/2}}-$$

$$+[\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mp}\left(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_m\right)^{u-0.5}}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^u}$$

$$+\frac{\sum_{m=p}^{k}\delta_{mk}\left(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p\right)^{u-0.5}}{[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^u}]\}\boldsymbol{d}_m=0$$

$$A_{pm}=-\frac{2^u d_0^u P_n^u}{n^2 a_0 G_a^u}-\frac{2^{u+1}2s d_0^u P_n^u}{G_a^{u+1}}+\frac{2^{u+1.5}d_0^{u-0.5}P_n^{u-0.5}}{G_a^{u+0.5}}=$$

$$=-\frac{2^s d_0^{u-0.5}P_n^{u-0.5}}{G_a^7}\left(\frac{\sqrt{d_0 P_n}}{n^2 a_0}+\frac{4u\sqrt{d_0 P_n}}{G_\alpha}-\frac{2^{1.5}}{\sqrt{G_a}}\right)=0$$

Из этого квадратного уравнения имеем значение собственного числа

$$\frac{1}{\sqrt{G_a}}=\frac{\sqrt{2}\pm\sqrt{2-\frac{4ud_0P_n}{n^2a_0}}}{4u\sqrt{d_0P_n}}=\frac{\sqrt{2}\pm\sqrt{2+4u\cdot(2u-2)P_n}}{4ui\sqrt{(2u-2)n^2a_0P_n}}$$

Откуда имеем значение период

$$G_a=-\frac{(4u)^2(2u-2)n^2a_0P_n}{\left(\sqrt{2}\pm\sqrt{2+4u\cdot(2u-2)P_n}\right)^2}$$

Полная энергия ядра равна

$$E_n=A\frac{e^2}{d_0}(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha,\boldsymbol{d}_p)^u\Big/[(\sum_{s=p}^{m}\boldsymbol{d}_s+|m-p+0.5|\boldsymbol{G}_\alpha)^2]^u$$

$$=A\frac{e^2}{d_0}\frac{2^u d_0^u}{G_a^u}=-A\frac{e^2}{a_0}2^u[(2u-2)n^2]^{u-1}[\frac{\left(\sqrt{2}\pm\sqrt{2+4u\cdot(2u-2)P_n}\right)^2}{[(4u)^2(2u-2)n^2P_n]}]^u$$

Термоядерной реакции соответствует $n=1, A=2; u=5.73;$ $\sqrt{U_+U_-}=88c$ отношение энергии на единицу массы для термоядерной реакции вычислено правильно $U^2 = 7.05\frac{10^{24}\text{эрг}}{\text{г}}$. Атомному взрыву соответствует $n = 7, A = 235; u = 4.52;\sqrt{U_+U_-}$=0.03c отношение энергии на единицу массы для атомного взрыва вычислено правильно U^2=8.1$\frac{10^{17}\text{эрг}}{\text{г}}$.

Я определили величину u по значению энергии на единицу массы для элементов, участвующих в реакции взрыва. На самом деле существует зависимость от спинового момента $u = \frac{1}{2}S(S+1) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{n})$. Кандидами на значение показателя степени являются члены, например $u = \frac{1}{2}S(S+1) + \frac{1}{2}Scos\varphi = 5.73; S = 3; \varphi = 1.75; u = 4.52; S = 3, \varphi = 2.978$. Как показал численный эксперимент, параметры спина и угла определяются однозначно. Данная формула очень похожа на комплексную $u = \frac{1}{2}S(S+1) + \frac{1}{2}iS$ физический смысл которой $\frac{1}{2}S(S+1)\cos(argu) + \frac{1}{2}Ssin(\omega t + argu) \rightarrow \sqrt{< u^2 >} = \frac{1}{2^{1.25}}\sqrt{S^2(S+1)^2 + S^2} = 5.27$. Эта величина характеризует атомный взрыв, переходящий в термоядерный взрыв $\sqrt{U_+U_-} = 17.2c, \varphi = 2.08$. Взрыв с квантовым числом $S = 3.5$ имел бы u=6.78 и величину $\sqrt{U_+U_-} = 4306c$ и заставил бы гореть протоны, и вся атмосфера Земли сгорела бы.