

Решение. Потенциал φ_e поля, создаваемого электронами, получается вычитанием из общего потенциала Φ потенциала поля ядра Z/r . Поэтому энергия взаимодействия между электронами

$$U_{ee} = -\frac{1}{2} \int \varphi_e n dV = -\frac{Z}{2} \int \frac{n}{r} dV - \frac{1}{2} \int \varphi n dV = \\ = \frac{Z}{2} \int \frac{n}{r} dV - \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{4} \int n^{5/3} dV$$

(мы выразили φ через n согласно (70,3)). С другой стороны, энергия взаимодействия электронов с ядром U_{en} и их кинетическая энергия T равны

$$U_{en} = -Z \int \frac{n}{r} dV, \quad T = 2 \int_0^{p_0} \int \frac{p^2}{2} \frac{4\pi p^2 dp dV}{(2\pi)^3} = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int n^{5/3} dV.$$

Сравнивая эти выражения с предыдущим равенством, получим соотношение

$$U_{ee} = -\frac{1}{2} U_{en} - \frac{5}{6} T.$$

В то же время, согласно теореме вириала (см. I, § 10), для системы частиц, взаимодействующих по закону Кулона, имеем $2T = -U = -U_{en} - U_{ee}$.

В результате находим

$$U_{ee} = -\frac{1}{7} U_{en}.$$

§ 71. Волновые функции внешних электронов вблизи ядра

Мы видели (на основании модели Томаса — Ферми), что внешние электроны в сложных атомах (большие Z) находятся в основном на расстояниях $r \sim 1$ от ядра¹⁾. Ряд атомных свойств, однако, существенно зависит от электронной плотности вблизи ядра (мы встретимся с такими свойствами в § 72 и 120). Для определения порядка величины этой плотности проследим за изменением волновой функции электрона в атоме $\psi(r)$ при изменении r от больших ($r \sim 1$) расстояний к малым.

В области $r \sim 1$ поле ядра экранировано остальными электронами, так что потенциальная энергия $U(r) \sim 1/r \sim 1$. Энергия уровня электрона в этом поле $E \sim 1$. На расстояниях же порядка величины боровского радиуса в поле заряда Z ($r \sim 1/Z$) поле ядра можно считать неэкранированным: $U = -Z/r$. В переходной области, $1/Z \ll r \ll 1$, потенциальная энергия $|U|$ уже велика по сравнению с энергией электрона E и выполняется условие

$$\frac{d}{dr} \frac{1}{p} \sim \frac{d}{dr} \frac{1}{\sqrt{|U|}} \ll 1$$

¹⁾ В этом параграфе пользуемся атомными единицами.

(p — импульс), так что движение электрона квазиклассично. Сферически-симметричная квазиклассическая волновая функция

$$|\psi(r)| \sim \frac{1}{r\sqrt{p}} \sim \frac{1}{r|U|^{1/4}} \quad \text{при} \quad \frac{1}{Z} \ll r \ll 1, \quad (71,1)$$

порядок величины коэффициента в ней (~ 1) определяется условием $\psi \sim 1$ «сшивания» с волновой функцией при $r \sim 1$.

Применяя выражение (71,1) по порядку величины при $r \sim 1/Z$ (подставив в него $U = -Z/r$), получим искомое значение волновой функции вблизи ядра ¹⁾

$$\psi\left(\frac{1}{Z}\right) \sim \sqrt{Z}. \quad (71,2)$$

В соответствии с общими свойствами волновых функций в центральном поле (§ 32) при дальнейшем уменьшении расстояния $\psi(r)$ либо остается, по порядку величины, постоянной (для s -электрона), либо начинает убывать (при $l \neq 0$).

Вероятность нахождения электрона в области $r \lesssim 1/Z$:

$$\omega \sim |\psi|^2 r^3 \sim \frac{1}{Z^2}. \quad (71,3)$$

Разумеется, формулы (71,2) — (71,3) определяют лишь систематический ход изменения величин с увеличением Z , без учета несистематических изменений при переходе от одного элемента к следующему.

§ 72. Тонкая структура атомных уровней

Последовательный вывод формул для релятивистских эффектов во взаимодействии электронов относится к другому тому этого курса (см. IV, § 33, 83). В настоящем же параграфе дается лишь общее описание этих эффектов в применении к изучению атомных термов.

Оказывается, что релятивистские члены в гамильтониане атома распадаются на две категории — одни из них линейны относительно операторов спинов электронов, а другие квадратичны по ним. Первые соответствуют как бы взаимодействию орбитального движения электронов с их спинами; его называют *спин-орбитальным взаимодействием*. Вторые же отвечают взаимодействию между спинами электронов (*взаимодействие спин — спин*). Оба вида взаимодействий одинакового порядка (второго) по v/c — отношению скорости электронов к скорости света. Фактически, однако, в тяжелых атомах взаимодействие спин — орбита значительно превышает взаимодействие спин — спин. Это связано

¹⁾ Для определения коэффициента в этой формуле (при известной волновой функции в области $r \sim 1$) надо было бы воспользоваться в области $r \lesssim 1/Z$ выражением (36,25).