

## Следствие из формул многоэлектронного атома

Салосин Е.Г.

e-mail [salosinevgeniy@rambler.ru](mailto:salosinevgeniy@rambler.ru)

Следствием учета взаимодействия электронов может быть их большая положительная энергия, чем энергия взаимодействия электронов с ядром. И если увеличение заряда ядра может составлять 100%, то изменение главного квантового числа у взаимодействия электронов между собой и между ядром и электронами может отличаться в разы, т.е. 400-1000%, причем волновая функция взаимодействия электронов и ядра этого состояния может стремиться к нулю, а волновая функция взаимодействия электронов между собой не стремится к нулю. При этом полная энергия многоэлектронного атома становится положительной и нужны катализаторы, чтобы создать отрицательную энергию атома.

Собственная энергия атома складывается из двух частей. Из энергии водородоподобного атома, отвечающего за энергию взаимодействия электронов и ядра и энергию взаимодействия электронов между собой. Эту величину нужно разделить на  $2Z - 1$  см. формулу (1), в следствии нормировки волновой функции взаимодействия. Никакой экранировки нет, есть сумма наложения разных потенциалов, и, следовательно, энергий. Электроны слишком маленькие, чтобы что-то экранировать. Экранировка имеет относительный порядок  $\frac{r_e^2}{a_0^2} \sim 10^{-9}$ .

Впервые я понял, что энергия многоэлектронного атома может быть положительной, а энергия ионизации отрицательной рассчитывая энергию атома в [1]. Потом я понял, что и приведенная ниже формула (1) может

определять положительную энергию из-за разных главных квантовых чисел у взаимодействия электронов между собой и у взаимодействия электронов с ядром  $n > k$ . Причем в [1], это проявилось отчетливо из-за построенных графиков энергии ионизации, когда я считал с помощью теории возмущений поправку к энергии водородоподобного атома. Потом я вывел формулу (1) см. [2] и понял, что главные квантовые числа могут быть разные при взаимодействии электронов между собой и между ядром и электронами.

$$E_{nkLS} = Z \frac{\int_0^\infty [E_n Z R_{nl}^2 + e_k (Z-1) \mathfrak{R}_{kl}^2] r^2 dr}{\int_0^\infty [Z R_{nl}^2 + (Z-1) \mathfrak{R}_{kl}^2] r^2 dr} =$$

$$= -\frac{m_e c^2}{137^2 (2Z-1)} \frac{Z^4}{2n^2} - \frac{m_e c^2}{137^2 (2Z-1)} \frac{Z(Z-1)}{16k^2} \times$$

$$\times \left[ 1 + i \frac{(S+1)(S+2)[0.26 + (S+7)(S+8)]}{(L+1)(L+2)} \alpha^{\frac{L_{eff}}{2}} 0.637 \right] \quad (1)$$

Исправляют данную ситуацию с помощью катализаторов, которые переводят нулевую волновую функцию взаимодействия электронов с ядром в большое значение и, значит, делают энергию атома отрицательной, а потенциал ионизации положительным. Причем катализаторами может быть как внешнее поле, так и добавка к основной молекуле другого элемента таблицы Менделеева. В целом катализаторы почти не изменяют энергию молекулы, но изменяют ее волновую функцию, с нулевой на конечную см. [3].

Приведу вычисленную полную энергию атома. Значений экспериментальных данных об этих значениях полной энергии атомов я не нашел в интернете кроме атомов водорода и гелия, которые совпали с экспериментальным значением.

Z	1	2	3	4	5	6	7	8	9
E	-0.5	-2.901	-2.258	-4.596	-8.639	-14.66	-21.	-34.08	-48.13
Z	10	11	12	13	14	15	16	17	18
E	-65.53	-38.32	-49.94	-63.41	-78.97	-92.96	-117.4	-140.5	-166.5

В [1] независимым способом вычислен спектр атомов в атомных единицах. Выведенные на печать данные прилагаю

$E =$	1	-0.5
	2	-2.901
	3	-2.796
	4	-5.387
	5	-7.962
	6	-13.012
	7	-21.287
	8	-33.537
	9	-50.512
	10	-72.963
	11	-38.757
	12	-51.941
	13	-62.638
	14	-76.553
	15	-94.019
	16	-115.369
	17	-140.938
	18	-171.058

Имеется совпадение по порядку величины значений 1, 2, 3 периода с точностью 5%. Какой-то из алгоритмов врет. Скорее на одном участке правилен один алгоритм, а на другом другой алгоритм.

Я привожу значение отрицательной полной энергии атома для подтверждения правильности формулы (1). Полная положительная энергия многоэлектронного атома для другого главного квантового числа — это другое описание  $n > k$ . Причем основное состояние соответствует значениям  $n = k$  и у основного состояния атома полная энергия отрицательная и энергия ионизации положительная. Но имеются и состояния с  $n \neq k$ , в частности  $n > k$ .

Условия с положительной действительной частью комплексной полной энергии многоэлектронного атома не устойчивые и переходят к основному состоянию атома  $n = k$ . Получается, что состояний с положительной действительной частью комплексной полной энергией многоэлектронного атома нет, есть только основные состояния и состояния с энергией  $n < k$ , т.е. состояния с отрицательной частью комплексной собственной энергией. Атом с положительной действительной частью комплексной энергии отличается от атома с положительной действительной энергией.

Вообще то, положительная действительная собственная энергия атома означает эксцентриситет больше 1, т.е. удаление на бесконечность, но в квантовой механике, говорится что все состояния вырождены, пробегающие все целые значения  $l \in [0, \infty]$ , фактически удаляется на бесконечность, так как при увеличении  $l$  знак волновой функции чередуется от значения плюс до значения минус и обратно и она в среднеарифметическом значении стремится к нулю.

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \lim_{l \rightarrow \infty} \left[ \sin \left( kr + \frac{1}{k} \ln 2kr + \delta_l \right) \cos \pi s - \cos \left( kr + \frac{1}{k} \ln 2kr + \delta_l \right) \cdot \sin \frac{\pi}{2} (2u + 1) \right] = 0; s = l/2; u = l/2 - 1/2$$

Значит при произвольном радиусе волновая функция стремится к нулю. Ноль волновой функции соответствует энергии атома, с точностью до константы

$$ER_{kl} = i\hbar \frac{\partial R_{kl}}{\partial t}$$

При нулевой волновой функции энергия вычисляется с точностью до константы

$$E + const = T_{\text{кин}}(r) - \frac{Ze^2}{r} + const1$$

Значение потенциала Кулона также определяется с точностью до константы. Итого получив нулевую постоянную энергию на бесконечности радиуса, в некоторой инерциальной системе координат, получаем равенство

$$E = T_{\text{кин}}(r) - \frac{ze^2}{r} + \text{const2} = 0 \quad (1)$$

Но при суммировании вклада всех частиц с положительной полной энергией образовалась бы бесконечность энергии, что является не правильным, и значит полная энергия частиц равна нулю в некоторой системе координат, Получив нулевую полную энергию в инерциальной системе координат, в другой инерциальной системе координат оно образует плоскую волну с нулевой суммарной энергией. Можно добиться равенства нулю кинетической энергии на бесконечности используя четырехмерную скорость.

Запишем преобразование координат относительно двигающейся с произвольной четырехмерной скоростью системы отсчета см. [4]

$$R'_k - R'_{k0} - \int_0^s u'_{k0}(s) ds = R_k - R_{k0} - \int_0^s u_{k0}(s) ds = 0; k = 0, \dots, 3$$

Тогда имеем инвариантность разности координат и времени относительно этого преобразования

$$R'_k - R'_{k1} = R_k - R_{k1}; k = 0, \dots, 3 \quad (2)$$

Причем уравнение ОТО инвариантно относительно этого преобразования произвольно двигающихся систем координат, важно только что их скорость зависит от интервала. Кроме того, координата  $R_{k1}$  является фиксированным центром тела, а координата  $R'_{k1}$  означает измененную координату центра тела. Причем центр тела, это начало системы координат, а координата  $R_k$  это текущая координата наблюдения за полем.

Отмечу, что добавка постоянного слагаемого не изменит равенство (2)

$$R'_k - R'_{k1} + \text{const} = R_k - R_{k1} + \text{const}; k = 0, \dots, 3 \quad (3)$$

И с помощью равенства (3) можно добиться равенства нулю соотношения (1), причем оно будет справедливо в движущейся с произвольной скоростью систем координат, не только инерциальных. .

## Литература

1. Салосин Е.Г. Вычисление энергии многоэлектронного атома, учитывая взаимодействие электронов между собой «Энциклопедический фонд России», 2022, 10 стр. [http://russika.ru/userfiles/1691\\_1677968532.pdf](http://russika.ru/userfiles/1691_1677968532.pdf)
2. Якубовский Е.Г. Парное описание взаимодействия элементарных частиц описывает их волновую функцию «Энциклопедический фонд России», 2023, 11 стр. [http://russika.ru/userfiles/390\\_1678100512.pdf](http://russika.ru/userfiles/390_1678100512.pdf)
3. Якубовский Е.Г. Влияние сильного электромагнитного поля на атом «Энциклопедический фонд России», 2023, 10 стр. [http://russika.ru/userfiles/1691\\_1676463833.pdf](http://russika.ru/userfiles/1691_1676463833.pdf)
4. Салосин Е.Г. Работа с четырехмерной скоростью «Энциклопедический фонд России», 2023, 4 стр. [http://russika.ru/userfiles/1691\\_1678292163.pdf](http://russika.ru/userfiles/1691_1678292163.pdf)