

Вычисление энергии электрона в произвольном атоме

с учетом релятивистской поправки

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

Экранировку ядра в атоме можно учитывать по-разному. Можно вводить эффективный заряд ядра, который имеет меньшее значение по сравнению с не экранированным ядром. Но экранировка сказывается только вблизи от экранирующего электрона на расстоянии комптоновской длины волны. Кроме того, экранировка требует наличие проводника, в котором при переменном электрическом поле волна затухает. Поле ядра постоянно и, следовательно, понятие затухания за счет скин-эффекта для него не применимо. Ослабление влияния внешних электронов на энергию ядра нужно учесть, используя взаимодействие электронов в их относительном движении.

1. Определение энергии электрона в атоме водорода

Зная потенциальную энергию элементарной частицы можно определить ее полную энергию по теореме вириала для релятивистских частиц см. [2] §34, формула (34.4)

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} + U = mc^2 + \frac{mV^2}{2} + U = mc^2 \langle \sqrt{1 - V^2 / c^2} \rangle \quad (1.1)$$

В случае комплексной энергии для массивных тел это равенство превращается в

$$E = mc^2 + \operatorname{Re} U = mc^2 \langle \sqrt{1 - V^2 / c^2} \rangle = mc^2 - m[(\operatorname{Re} V)^2 - (\operatorname{Im} V)^2]$$
$$\operatorname{Im} U = 2 \operatorname{Re} V \operatorname{Im} V$$

При этом для комплексной энергии теорема вириала запишется в виде

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re} E &= \sqrt{(\sqrt{(m^2 c^4 + \operatorname{Re} p^2 c^2)^2 + (\operatorname{Im} p^2 c^2)^2} + m^2 c^4 + \operatorname{Re} p^2 c^2)/2 + \operatorname{Re} U} = \\
&= \sqrt{(\sqrt{(m^2 c^4 - \operatorname{Re} p^2 c^2)^2 + (\operatorname{Im} p^2 c^2)^2} + m^2 c^4 - \operatorname{Re} p^2 c^2)/2} \quad (1.2) \\
\operatorname{Im} E &= \sqrt{(\sqrt{(m^2 c^4 + \operatorname{Re} p^2 c^2)^2 + (\operatorname{Im} p^2 c^2)^2} - m^2 c^4 - \operatorname{Re} p^2 c^2)/2 + \operatorname{Im} U} = \\
&= \sqrt{(\sqrt{(m^2 c^4 - \operatorname{Re} p^2 c^2)^2 + (\operatorname{Im} p^2 c^2)^2} - m^2 c^4 + \operatorname{Re} p^2 c^2)/2}
\end{aligned}$$

Задача сводится к вычислению поправки к потенциальной энергии

$$U(1 + \Delta) = U + p^2 / m - p^4 / 4m^3 c^2, \Delta = -p^4 / 4m^3 c^2 / U$$

Полная энергия системы, (в не релятивистском приближении равная сумме энергии покоя, потенциальной энергии и кинетической энергии) равняется усредненной правой части. При переходе к не релятивистским скоростям, получаем что потенциальная энергия, равна взятой со знаком минус удвоенной кинетической энергии, что соответствует теореме вириала для не релятивистских частиц.

При этом справедливо из левой части (1.1) $mc^2 + U = mc^2 - \frac{Ze^2}{r} > 0$. Т.е.

в поле притяжения ядра радиус электрона удовлетворяет условию $r > \frac{Ze^2}{mc^2}$.

Это аналог условия ОТО, что гравитационный радиус черной дыры во внешней системе координат не достижим за конечное время.

Возводя уравнение в квадрат, получим

$$U^2 + 2U\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} + m^2 c^4 \beta^2 \frac{2 - \beta^2}{1 - \beta^2} = 0; \beta = V / c$$

Приведем подобные члены этого уравнения, оно сводится к уравнению

$$2u\sqrt{1 - \beta^2} = \beta^2(2 - \beta^2) - u^2; u = -U / mc^2.$$

Возведем это уравнение в квадрат и приведем подобные члены

$$\beta^8 - 4\beta^6 + 4(1 - u^2)\beta^4 + 8u^2\beta^2 - 4u^2 + u^4 = 0$$

Решаем уравнение $4(1 - u^2)\beta^4 + 8u^2\beta^2 - 4u^2 + u^4 + O(u^6) = 0$, получим

$$\beta^2 = \frac{-u^2 \pm \sqrt{u^4 + (u^2 - u^4/4)(1-u^2)}}{1-u^2} + O(u^5).$$

Получаем положительный корень при малом потенциале. При большом потенциале уравнение не справедливо, получим с кубической точностью

$$\beta^2 = u \frac{-u + \sqrt{(1-u^2/4)(1-u^2) - u^2}}{1-u^2} = u(1-u) + O(u^3) \quad (1.3)$$

Для действительных импульсов поправка к потенциальной энергии равна $U(1+\Delta) = U - p^4/4m^3c^2$. Для перехода от среднего от правой части теоремы вириала на значение функции от среднего нужно уточнить значение потенциала для чего к отрицательной величине U надо добавить долю среднего квадрата значения, т.е. вычислить долю квадрата среднего

$$1+\Delta = 1 - \frac{Uk^2}{mc^2} \left[\frac{1}{k(l+1)} + \frac{1}{4k^2} \right].$$

Средний квадрат равен произведению средних значений двух функций плюс корреляционная функция. Для получения корреляционной функции произведения величин $\sqrt{P_k(\cos \chi_1)P_k(\cos \chi_2)}$ нужно для вращательного движения учесть, что в плоскости вращения имеется $l+1$ область, так как отклонение соответствует вращательному движению с орбитальным моментом l , а в перпендикулярной плоскости k областей.

Итого имеем $\sqrt{P_k(\cos \chi_1)P_k(\cos \chi_2)} = \frac{1}{k(l+1)}$. Для получения значения произведения средних возникает деление на двойку, так как имеются в мультиполе положительные и отрицательные заряды. В результате произведение средних складывается из квадрата среднего отклонения $1/(2k)^2$.

Кроме того, надо учесть, что среднее от потенциала равно $1/k^2$. Итого

получается величина $U - \left(\frac{U}{mc^2}\right)^2 k^2 \left[\frac{1}{k(l+1)} + \frac{1}{4k^2} \right]$. Эта добавка учит

вращательное спин-орбитальное взаимодействие. Получается среднее значение потенциала с учетом вращательного движения. А по среднему значению потенциала можно вычислить и полную энергию системы.

Имеем следующее значение скорости, воспользовавшись уравнением (1.3).

$$\beta^2 = -\frac{U}{mc^2} - \left(\frac{U}{mc^2}\right)^2 + O\left(\frac{U}{mc^2}\right)^3.$$

Это значение скорости удовлетворяет предельному переходу к не релятивистским скоростям теоремы вириала. При этом полная собственная энергия системы равна

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \sqrt{1 + \frac{U(1+\Delta)}{mc^2} + \left[\frac{-U(1+\Delta)}{mc^2}\right]^2} = \\ &= mc^2 + \frac{U}{2}(1+\Delta) + \frac{U^2}{2mc^2} + \dots = mc^2 + \frac{U}{2} - \frac{U^2}{2mc^2} \left(\frac{k}{l+1} - \frac{1}{4}\right); \Delta = -\frac{U}{mc^2} \left(\frac{k}{l+1} + \frac{1}{4}\right) \end{aligned}$$

Т.е. получена общая формула для собственного значения энергии в случае вращательного движения частицы. Причем она справедлива для водородоподобного атома.

Потенциал в атоме

$$\begin{aligned} U_k = q\varphi_k &= -\frac{Ze^2 l_{\gamma k}^k}{k^2 R_0^{k+1}} N_e = -\frac{Ze^2 l_{\gamma k}^k}{k^2 a_0^{k+1}} \frac{m_e}{m_{\gamma k}} = -\frac{Ze^2 m_e c^2}{k^2 a_0^{k+1} e^2} r_{\gamma}^{k+1} = \\ &= -\frac{Ze^2}{k^2 a_0} = -\frac{Z^2 mc^2 \alpha^2}{k^2} \end{aligned}$$

Используем формулу $\frac{l_{\gamma k}^k}{m_{\gamma k}} = \frac{c^2}{e^2} r_{\gamma}^{k+1}$. При этом образующая мультиполя равна

$$\begin{aligned} a_0^k &= m_e \frac{c^2}{e^2} r_{\gamma}^{k+1} \\ r_{\gamma} &= \left(\frac{a_0^k e^2}{m_e c^2}\right)^{\frac{1}{k+1}} \end{aligned}$$

Эта формула является обобщением формулы, справедливой для диполей $r_{\gamma l} = \sqrt{a_0 r_e}$, описывающей основное состояние атома водорода. Можно предположить, что она носит общий характер, и описывает не только атом водорода.

При этом вычисление величины квадрата потенциальной энергии

$$(U_k)^2 = \frac{Z^4 e^4 l_{jk}^{2k}}{k^4 R_0^{2k+2}} \frac{m_e^2}{m_\gamma^2} = \frac{Z^4 e^4 m_e^2 c^4}{k^4 a_0^{2k+2}} r_\gamma^{2k+2} = \frac{Z^4 e^4}{k^4 a_0^2} = m_e^2 c^4 \frac{Z^4 \alpha^4}{k^4}; \alpha = \frac{1}{137}$$

Результирующая формула совпадает с формулой, полученной в квантовой электродинамике см. [3] формула (34.4)

$$E_k = m_e c^2 \left[1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2k^2} - \frac{Z^4 \alpha^4}{2k^3} \left(\frac{1}{l+1} - \frac{3}{4k} \right) + \dots \right].$$

2. Учет взаимодействия электронов в атоме

Основным свойством телесного угла является равенство см. [1] глава III, раздел 54.

$$\text{grad} \Omega = \oint \frac{[d\mathbf{l}, \mathbf{r}]}{r^3}.$$

Причем при вращении вершины телесного угла, по замкнутому пути, проходящем через поверхность, натянутой на замкнутый контур телесный угол получает приращение 4π .

$$\oint (\text{grad} \Omega, dx) = 4\pi(n + 1/2) = \Omega + 4\pi n.$$

Слагаемое $1/2$ является следствием нахождения начальной вершины телесного угла на поверхности, натянутой на заданный контур.

При этом имеем $\psi^1 = \exp(i\Omega/2), \psi^2 = \exp(-i\Omega/2), \psi = \left\| \begin{array}{l} \exp(i\Omega/2) \\ \exp(-i\Omega/2) \end{array} \right\|$.

Причем справедливо

$$\begin{aligned} (s_x \psi)^1 &= \frac{\psi^2}{2}; (s_y \psi)^1 = -\frac{i\psi^2}{2}; (s_z \psi)^1 = \frac{\psi^1}{2} \\ (s_x \psi)^2 &= \frac{\psi^1}{2}; (s_y \psi)^2 = \frac{i\psi^1}{2}; (s_z \psi)^2 = -\frac{\psi^2}{2} \end{aligned}$$

Где s_x, s_y, s_z это матрицы Паули. Это аналог вращения угла в одной плоскости вокруг заданной точки. При вращении вокруг точки по замкнутому пути угол получает приращение 2π . При вращении вершины телесного угла проходя поверхность, натянутую на заданную кривую, получается приращение 4π .

Тогда волновая функция собственного вращения равна $\exp[i s \oint (\text{grad} \Omega, dx)] = \exp[i(\Omega + 4\pi k)s] = \exp(i\Omega s), s = 1/2$.

При этом телесный угол определяет спиновый оператор поворота вокруг произвольной оси

$$\begin{aligned}
 R_n(\Omega) &= \exp(i\Omega s_n) = \exp(i\Omega \sigma_n / 2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\Omega/2)^k}{k!} \sigma_n^k = \\
 &= E \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\Omega/2)^{2k}}{(2k)!} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\Omega/2)^{2k+1}}{(2k+1)!} \sigma_n = E \cos \Omega/2 + i \sigma_n \sin \Omega/2 = \\
 &= \left\| \begin{array}{cc} \cos \Omega/2 + i n_z \sin \Omega/2 & i n_- \sin \Omega/2 \\ i n_+ \sin \Omega/2 & \cos \Omega/2 - i n_z \sin \Omega/2 \end{array} \right\|, \sigma_n = (\sigma_i, n_i) = \left\| \begin{array}{cc} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{array} \right\|
 \end{aligned}$$

А производная по телесному углу определяет собственное значение

$$-i \frac{\partial R_n(\Omega)}{\partial \Omega} = s_n R_n(\Omega) = s R_n(\Omega); R_n(\Omega) = \exp(i s_n \Omega)$$

Но как определить азимутальный угол. Для этого продолжим угол θ на величину $\Theta = 2\pi(l + 1/2)$. Тогда половина этого угла определит положительный радиус телесного угла. На следующем периоде координата x_3 изменит свой знак, т.е. будет описана и отрицательная проекция σ_z . Формула преобразования координат

$$\sigma_i x_i = \left\| \begin{array}{cc} x_3 & x_1 - i x_2 \\ x_1 + i x_2 & -x_3 \end{array} \right\| = r \left\| \begin{array}{cc} \cos \Theta/2 & \sin \Theta/2 \exp(-i\Omega/2) \\ \sin \Theta/2 \exp(i\Omega/2) & -\cos \Theta/2 \end{array} \right\|.$$

с центром электрона в точке О, лежащим в центре окружности. и образовать поверхность, натянутую на эту окружность В,С. Причем окружность и натянутая на эту окружность поверхность В,С должны лежать в одной произвольной плоскости, перпендикулярной плоскости рисунка. При этом вершина телесного угла А, начальная точка которого, находящаяся на этой поверхности В,С в центре окружности, будет двигаться перпендикулярно натянутой поверхности вдоль прямой, проходящей через центр электрона и окружности точка О. Телесный угол при возврате в начальную точку вблизи поверхности, снизу от нее равен 2π , а сверху от нее равен -2π и испытает

скачок 4π проходя через поверхность, как и угол φ сферической системы координат испытывает скачок 2π при возврате в начальную точку и его надо продолжить как многозначную функцию. Так же как угол φ лежит в одной плоскости, перпендикуляр, который описывает вершина телесного угла Ω , изменяется снизу на отрезке $[0, 2\pi]$, а сверху на отрезке $[-2\pi, 0]$. Тогда центр электрона является центром поворота на угол $\varphi = \Omega/2$, в плоскости, перпендикулярной рисунку. Проекция этой окружности отрезок ВОС. Образуем угол поворота на $2\theta = \Theta \in [0, 2\pi]$, лежащий в произвольной плоскости, ортогональной натянутой на окружность поверхности, и проходящей через центр электрона. Половина этого угла соответствует углу сферической системы координат $\theta = \Theta/2$.

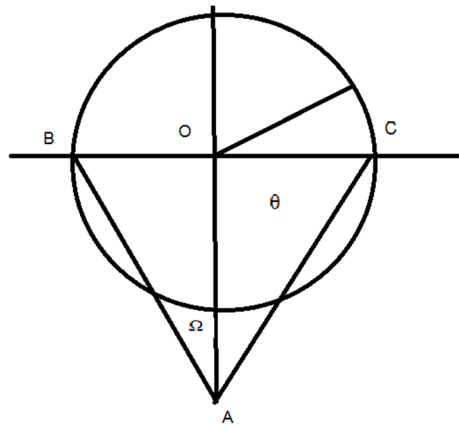


Рис.1 Изображение телесного угла

Точка О центр электрона. Точки В,С проекция окружности, с плоскостью, перпендикулярной плоскости рисунка, на которую натянута поверхность ВС. Точка А вершина телесного угла $\varphi = \Omega/2$. Угол φ описывает окружность, плоскость которой перпендикулярна плоскости рисунка, и проекция которой отрезок ВОС. Угол $\theta = \Theta/2$.

В книге [1] глава III, раздел 55 приведена формула

$$\int_{12} \mathbf{B} ds = \frac{I}{c} (\Omega_2 - \Omega_1).$$

Перепишем эту формулу в виде в случае если изменение координаты происходит в одной плоскости

$$B_\varphi r(\varphi) d\varphi = \frac{I}{c} d\Omega.$$

Полагая все коэффициенты равными константе, получаем

$$d\varphi = K d\Omega, K = const$$

В силу значения периода угла φ , равного 2π и периода у телесного угла, равного 4π , получаем связь между коэффициентами $\varphi = \Omega / 2$.

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi.$$

В этом уравнении используются введенные углы спинов, и оператор Лапласа выглядит таким образом

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \\ &+ \frac{\alpha}{4r^2} \left[\frac{1}{\sin \Theta/2} \frac{\partial}{\partial \Theta/2} (\sin \Theta/2 \frac{\partial}{\partial \Theta/2}) + \frac{1}{\sin^2 \Theta/2} \frac{\partial^2}{\partial (\Omega/2)^2} \right] = \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L(L+1) + \alpha \frac{\sigma}{2} (\frac{\sigma}{2} + 1)}{r^2}, L_{eff} (L_{eff} + 1) = L(L+1) + \alpha \frac{\sigma}{2} (\frac{\sigma}{2} + 1); \end{aligned}$$

$$\alpha = \mp \left(\frac{e}{\sqrt{\hbar c}} \right)^{L/2} = \mp \frac{1}{137^{L/2}}, E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (n_r + L_{eff} + 1)^2}$$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sin \Theta/2} \frac{\partial}{\partial \Theta/2} (\sin \Theta/2 \frac{\partial}{\partial \Theta/2}) - \frac{(\sigma_z)^2}{\sin^2 \Theta/2} + \sigma(\sigma + 2) = 0 \\ \psi(r, \Theta, \Omega) &= R_{n_r L_{eff}}(r) Y_{lm}(\theta) Y_{\sigma \sigma_z}(\Theta/2) \exp(im\varphi + i\sigma_z \Omega/2) \quad (1.5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{n_r L}(r) = F(-n_r, L_{eff}, r) &= \frac{1}{L_{eff} (L_{eff} + 1) \dots (L_{eff} + n_r - 1)} z^{1-L_{eff}} \times \\ &\times \exp(r) \frac{d^{n_r}}{dr^{n_r}} [\exp(-r) r^{n_r + L_{eff} - 1}]; \end{aligned}$$

Где величина σ, σ_z определяют суммарный модуль спина электронов, и его проекцию. Сферические функции полуцелого порядка определяются полиномом Лежандра нечетного порядка $Y_{\sigma \sigma_z}(\Theta/2) \sim P_{\sigma}^{\sigma_z}(\cos \Theta/2)$.

Экспериментально определена и приведена в [2] поправка к возбужденному состоянию атома гелия при условии $L = 0,1,2$ и суммарному спину $S = 0,1$. При условии $S = 0$ поправка равна нулю, поэтому считалась удвоенная поправка при $S = 1/2$.

При суммарном спине электронов равном $S = 0$.

L	0	1	2
$\Delta_L, \text{эксперимент}$	-0.14	0.012	-0.0022
$\Delta_L, \text{теория}$	-0.137	0.0428	-0.00219

При суммарном спине электронов равном $S = 1$.

L	0	1	2
$\Delta_L, \text{эксперимент}$	-0.296	-0.068	-0.0029
$\Delta_L, \text{теория}$	-0.21	-0.058	-0.00292

При положительной поправки Ридберга наблюдается расхождение с экспериментом. При орбитальном квантовом числе, равном $L=3$ поправка равна $\Delta_{L=3} = -10^{-7}$, поэтому ее экспериментальное значение не приведено в [2].

Приведенная масса электрона при взаимодействии с другим электроном равна $m_e/2$, причем имеется $Z-1$ взаимодействий электрона с остальными электронами, причем считается поправка к энергии электрона с использованием частиц вакуума при другом знаке потенциальной энергии, что не скажется на свойстве частиц вакуума. Все равно определяются дискретные уровни энергии связанного состояния, но орбитальный момент импульса электрона в атоме заменится на спиновый момент импульса. Причем при вычислении энергии одного электрона взаимодействие электронов надо учитывать дважды, первого со вторым и второго с первым, так как вклад первого и второго электрона в энергию одного электрона одинаков.

Итого имеем формулу для собственной энергии электрона

$$E_k = m_e c^2 \left\{ 1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2k^2} - \frac{Z^4 \alpha^4}{2k^3} \left(\frac{1}{L_{eff} + 1} - \frac{3}{4k} \right) + \right. \\ \left. + (Z - 1) \frac{\alpha^2}{2n_s^2} + (Z - 1) \frac{\alpha^4}{2n_s^3} \left(\frac{1}{S/2 + 1} - \frac{3}{4n_s} \right) \right\}; \quad (1.6)$$

$$k = n_r + L_{eff} + 1; n_s = n_r + S/2 + 1$$

Орбитальный момент много электронного атома ограничен отрицательным значением нерелятивистской энергии

$$L_{eff} < (n_r + 1) \left(\sqrt{\frac{2Z^2}{Z - 1}} - 1 \right) + S \sqrt{\frac{Z^2}{2(Z - 1)}}$$

При описании взаимодействия электронов между собой надо использовать оператор Лапласа в виде

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{4r^2} \left[\frac{1}{\sin \Theta/2} \frac{\partial}{\partial \Theta/2} \left(\sin \Theta/2 \frac{\partial}{\partial \Theta/2} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta/2} \frac{\partial^2}{\partial (\Omega/2)^2} \right] = \\ = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{S(S + 1)}{r^2} \quad (1.7)$$

Энергия взаимодействия электронов положительна, но складываясь с энергией взаимодействия с ядром она обладает дискретными свойствами, и описывается частицами вакуума. Ее нельзя считать по формуле (1.7), так как вклад в потенциальную энергию положительный, и значит энергия состояния непрерывна, что не верно, как часть отрицательной энергии она дискретна.

Но собственное значение энергии у разных изотопов данного элемента разные. Это означает, что собственное значение энергии атома в общем случае зависит от числа протонов и нейтронов в ядре. При этом справедлива приближенная формула для главного квантового числа $n = 1 + 10(A/Z - 2)$, т.е. зная количество протонов и нейтронов можно определить главное квантовое число см. формулу (1.8).

При этом атомный вес определяется по приближенной формуле

$$A = \left(2 + \frac{n - 1}{10} \right) Z - \alpha, \alpha = \begin{cases} 0, n = 2, 6 \\ 2, n = 3 \\ 3, n = 4, 5, 6, 7 \end{cases}, \quad (1.8)$$

где величина n главное квантовое число, т.е. имеем приближенно число протонов равно числу нейтронов плюс добавка, зависящая от главного квантового числа.

Для атома гелия получаем в атомных единицах энергию атома $-E = Z^2 - (Z - 1) = 3at.ed$. При фактическом значении $2.9at.ed$. Оценка с помощью теории возмущений $2.75at.ed$. С помощью вариационного метода $2.85at.ed$ см. задачу к §69 в [2].

Была подсчитана энергия основного уровня 5 элементов таблицы Менделеева He, Li, Be, B, C

	He	Li	Be	B	C
Эксперим. энергия эв.	78.98	198.04	371.51	599.43	881.82
Теоретич. энергия эв.	81.7	190.6	354.04	571.92	844
Z	2	3	4	5	6

Теоретическая формула для подсчета энергии $-E = [Z^2 - (Z - 1)]78.98/2.9$.

Экспериментальные данные взяты из [3] §32.

Повысим точность аппроксимации, используя атомный вес элемента таблицы Менделеева

	He	Li	Be	B	C
Эксперим. энергия эв.	78.98	198.04	371.51	599.43	881.82
Теоретич. энергия эв.	81.72	198.17	365.1	583.4	861.2
Z	2	3	4	5	6
$N=A-Z$	2.0026	3.939	5.0122	5.811	7

Эмпирическая формула для подсчета энергии данных элементов

$-E = [Z^{17/9} N^{1/9} - (Z - 1)]78.98/2.9; N = A - Z$. Хотя нейтроны имеют нулевой заряд, но они состоят из кварков, которые имеют отрицательный и

положительный заряд. Кроме того, окончательная формулы для собственной энергии не зависит от заряда, а определяется массой электрона и безразмерными константами.

Существует эмпирическая формула с точностью до третьего знака теоретического и экспериментального значения энергии, но формула претендует на общий характер энергии произвольного атома поэтому 10% совпадение энергий достаточно.

Выводы

Электроны в атоме не экранируют потенциал ядра, экранирование распространяется на комптоновскую длину волны вблизи электрона. Для экранирования ядра атома электронами, нужно чтобы они образовали проводник тока, причем переменный ток должен зависеть от колебания напряжения, а в атоме имеется только постоянный потенциал ядра. Нужно учитывать взаимодействие между парами электронов, которое вносит больший вклад, чем поправки на спин-орбитальное взаимодействие. Существенный вклад на эффективное орбитальное квантовое число вносит спин электрона.

Литература

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. III. Электричество Физматлит, 2004, 656стр.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика Нерелятивистская теория т.III, Наука, М.,1969,768с.
3. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. Государственное издательство физико-математической литературы М.: 1963 г., 640стр.