Замена в статистических формулах температуры на полную энергию

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

В статистических формулах коэффициент пропорциональности у энергии равен обратной величине температуры. Воспользуется вместо температуры полной энергией среды. Формулы упростятся и появляется красивое уравнение состояния, где вместо температуры стоит полная энергия тела, которую можно вычислить.

Количество ячеек, содержащих атомы в молекулах равно см. [1]

$$dN = \frac{gVp^2 dp}{2\pi^2\hbar^3[\exp(\varepsilon-\mu)/T \pm 1]}$$

Равновесное распределение, определяемое из максимума энтропии определяется формулой

$$\overline{n}_k = \frac{1}{\exp(\alpha\varepsilon_k + \beta) \pm 1}$$

При замене температуры на полную энергию формула изменится

$$dN = \frac{gVp^2 dp}{2\pi^2\hbar^3[\exp(E-\mu)/E \pm 1]}$$

И полное число ячеек равно

$$N = \frac{gVp^3_{\max}}{6\pi^2\hbar^3[\exp(E-\mu)/E \pm 1]}$$

$$\exp(E-\mu)/E = \frac{gVp^3_{\max}}{6\pi^2\hbar^3} \mp 1$$

Подставляя значение граничного импульса $p_{\max} = \hbar(\frac{6\pi^2 N\nu}{V})^{1/3}$, получаем формулу

$$\exp(E-\mu)/E = g\nu \mp 1$$

Где величина ν количество атомов в ячейке, или в молекуле. Потенциал равен

$$\Omega = -T\sum_k \ln[1 \pm \exp(\mu - \varepsilon_k)/T]$$

$$\Omega = -E\ln[1 \pm \exp(\mu - E)/E]$$

Подставляя значение потенциала и экспоненты, получим

$$pV = E\ln\frac{g\nu}{g\nu \mp 1}$$

Но для бозе частиц для одного состояния энергии возможен одинаковый спин $g = 2s + 1$ и знак плюс в уравнении состояния. Знак минус требует усовершенствования формулы для ферми частиц, для которых для одной системы возможны только разные значения спина, т.е. для ферми частиц формула выглядит следующим образом

$$pV = E\sum_{k=1}^{\nu} \ln\frac{g_k\nu}{g_k\nu - 1}/\nu$$

Тогда выполняется условие

$$\varepsilon - 3p = \varepsilon(1 - 3\sum_{k=1}^{\nu} \ln\frac{g_k\nu}{g_k\nu - 1}/\nu) > 0; \nu > 1$$

Т.е. атом водорода невозможно считать по этой формуле, так как в ячейке один атом, имеющий спин 1/2, для него условие положительности разности плотности энергии и утроенном давлении не выполняется. Надо рассматривать взаимодействие атомов водорода и тогда каждый атом имеет свой спин и разность между плотностью энергии и утроенным давлением положительная. Получается, что газ из атомов водорода имеет связанные между собой состояние, что объясняет его взрывоопасность. Если бы газ состоял из молекул атома водорода, то удовлетворял условию существования, но наряду с молекулами атома водорода, имеется его свободное состояние, которое образует связанную систему.

Получена формула для уравнения состояния, где используется суммарная энергия всех ячеек данного вещества.

Формула для релятивистской энергии многоэлектронного атома имеет приближенное значение, но порядок величины вычислен верно, что и отражено в значениях температуры перехода в сверхпроводящее состояние. В случае электрона в много электронном атоме надо разлагать заряд электронов в атоме по формуле $Z=\sum_{n=0}^{3}\alpha_n;\alpha_n=\mathrm{int}[\frac{Z-\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_n}{4-n}](4-n);n=0,...,3;\alpha_{-1}=0$, где в квадратных скобках используется целая часть комплексного числа. Имеем формулу энергии электронов в атоме см. [1]

$$E_{nl}=\frac{Zm_ec^2}{\sqrt{1+(\frac{\alpha}{\beta_Z+\alpha_3}+\frac{\alpha}{\beta_Z+1+l_Z+\alpha_2})^2+(\frac{\alpha}{\beta_Z+1+l_Z+\alpha_1}+\frac{\alpha}{\beta_Z+1+l_Z+\alpha_0})^2+\frac{4\alpha^2}{(\beta_Z+Z)^2}}};$$

$$\alpha=\frac{n}{137(\sqrt{(l+1)^2-1/137^2}+n_r)3^{0.5}}\cong\frac{1}{137\cdot 3^{0.5}},$$

$$\beta_Z=\begin{cases}1,Z\in[1,2]\\2,Z\in[3,10]\\3,Z\in[11,18]\\4,Z\in[19,36]\\5,Z\in[37,54]\\6,Z\in[55,86]\end{cases};l_Z=\begin{cases}Z-1,Z\in[1,2]\\(10-Z)/2,Z\in[3,10]\\(18-Z)/2,Z\in[11,18]\\(36-Z)/2,Z\in[19,36]\\(54-Z)/2,Z\in[37,54]\\(86-Z)/2,Z\in[55,86]\end{cases}$$

Асимптотика этой формулы для атома водорода совпадает с известной формулой квантовой электродинамики, так как $\alpha_k=0,k=0,...2,\alpha_3=1$ для атома водорода. Для многоэлектронного атома формула описывает его спектр.

Кроме того, надо учесть энергию взаимодействия электронов с остальными электронами. Она равна

$$\Delta E_{Zl} = \frac{(Z-1)m_e c^2 0.5}{\sqrt{1+(\frac{\alpha}{\beta_z+1}+\frac{\alpha}{\beta_z+1+2l_z})^2+(\frac{\alpha}{\beta_z+1+2l_z}+\frac{\alpha}{\beta_z+1+2l_z})^2+\frac{4\alpha^2}{(\beta_z-1+2l_z+Z)^2}}} - \\ -(Z-1)m_e c^2 0.5$$

C

Суммарная энергия атома считается по формуле $E = -E_{nl} + \Delta E_{Zl}$

В случае молекулы $A_{n_p} B_{n_q}$ надо использовать формулы релятивистского значения энергии.

$$E_{nlpq} = \sqrt{Z_p Z_q} m_e c^2 /[1+(\frac{\alpha}{\beta_{Zp}+\alpha_{3Zp}}+\frac{\alpha}{\beta_{Zp}+1+l_{Zp}+\alpha_{2Zp}})(\frac{\alpha}{\beta_{Zq}+\alpha_{3Zq}}+\frac{\alpha}{\beta_{2q}+1+l_{Zq}+\alpha_{2Zq}})+ \\ +(\frac{\alpha}{\beta_{Zp}+1+l_{Zp}+\alpha_{1Zp}}+\frac{\alpha}{\beta_{Zp}+1+l_{Zp}+\alpha_{0Zp}})(\frac{\alpha}{\beta_{Zq}+1+l_{Zq}+\alpha_{1Zq}}+\frac{\alpha}{\beta_{Zq}+1+l_{Zq}+\alpha_{0Zq}})+ \\ +\frac{4\alpha^2}{(\beta_{Zp}+Z_p)(\beta_{Zq}+Z_q)}]^{0.5}$$

Энергия взаимодействия между парами электронов

$$\Delta E_{Zlpq} = \sqrt{(Z_p-1)(Z_q-1)} m_e c^2 0.5 /[1+(\frac{\alpha}{\beta_{zp}+1}+\frac{\alpha}{\beta_{zp}+1+2l_{zp}})\times \\ \times(\frac{\alpha}{\beta_{zq}+1}+\frac{\alpha}{\beta_{zq}+1+2l_{zq}})+(\frac{\alpha}{\beta_{zp}+1+2l_{zp}}+\frac{\alpha}{\beta_{zp}+1+2l_{zp}})(\frac{\alpha}{\beta_{zq}+1+2l_{zq}}+\frac{\alpha}{\beta_{zq}+1+2l_{zq}})+ \\ +\frac{4\alpha^2}{(\beta_{zp}+2l_{zp}+Z_p-1)(\beta_{zq}+2l_{zq}+Z_q-1)}]^{0.5} - \sqrt{(Z_p-1)(Z_q-1)} m_e c^2 0.5$$

Тогда суммарная энергия молекулы определяется по формуле

$$E = -E_{n,lpq} + \Delta E_{Zlpq}$$

Литература

1. Якубовский Е.Г. Формула для вычисления энергии ядра и многоэлектронного атома «Энциклопедический фонд России», 2019, 22 стр. http://russika.ru/userfiles/390_1568737792.pdf