

Лекція №1

Конденсований стан як ансамбль взаємодійних частинок.

1. Елементарні частинки у квантовій механіці.
2. Структурні одиниці речовини. Роль структурних одиниць формуванні властивостей конденсованих середовищ.
3. Ядра. Електронні оболонки.
4. Молекули.
5. Статистика ансамблів структурних одиниць. Сили взаємодії.

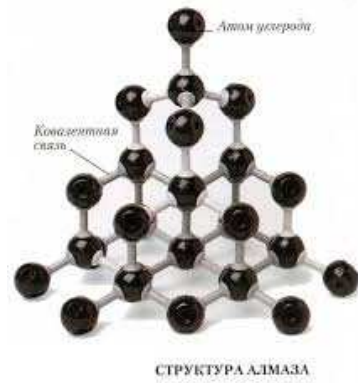
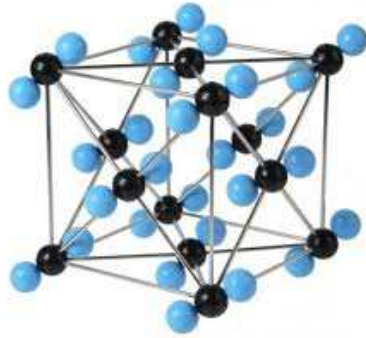
Перш ніж перейти до викладення матеріалу, пов'язаного з властивостями твердих тіл як конденсованого стану речовини, слід визначитися з основними поняттями. Що ж це таке – конденсований стан речовини? Як його можна визначити? Як не дивно, але краще за все слід почати з газу. Газоподібна речовина складається із гігантського числа частинок. Наприклад, в 1см^3 повітря міститься порядку 10^{19} молекул. Тобто, газ є системою багатьох частинок, або, можна сказати, газ є ансамблем частинок. Але ж рідини й тверді тіла теж є системами багатьох частинок, або ансамблями частинок?

То ж що їх різнить від газів? Газ може утримуватися в певному об'ємі тільки в тому випадку, коли він знаходиться в якій-небудь посудині. Поза посудиною молекули чи атоми газу розлітаються. У той же час частинки, що входять до складу рідини або твердого тіла, не розлітаються.



Состояние вещества	Свойства	Расстояние между молекулами	Рисунок
Газ	Нет собственной формы и объема	Большие размеры молекул	
Жидкость	Имеет собственный объем, принимает форму сосуда	Чуть меньше размеров молекул	
Твердое тело	Имеет собственную форму и объем	Сравнимые размеры молекул. Параллельное расположение молекул	

Стає очевидним та обставина, що газоподібні й конденсовані середовища відрізняються характером взаємодії між утворюючими їх частинками. Звідси витікає природне визначення конденсованого стану: це ансамблі частинок, об'єм яких за заданих зовнішніх умов визначається взаємодією між частинками. Наявність же сильної взаємодії між частинками конденсованого середовища (принаймні, у порівнянні зі взаємодією між частинками газу) приводить, як бачимо, до скорочення відстані між цими частинками, тобто, до збільшення густини середовища. Відстань між частинками середовища внаслідок цього стає порядку розміру самих частинок. Це, у свою чергу, приводить (принаймні, у випадку твердого тіла) до встановлення порядку в розташуванні частинок як «цеглинок» речовини:



Але також є причиною тієї обставини, що конденсоване середовище повинне а рїорї розглядатися як суто квантовий об'єкт, і тому вимагає опису на мові квантової механіки. Із цієї причини давайте згадаємо, як необхідно розуміти частинки в квантовій механіці.

Елементарні частинки в квантовій механіці.

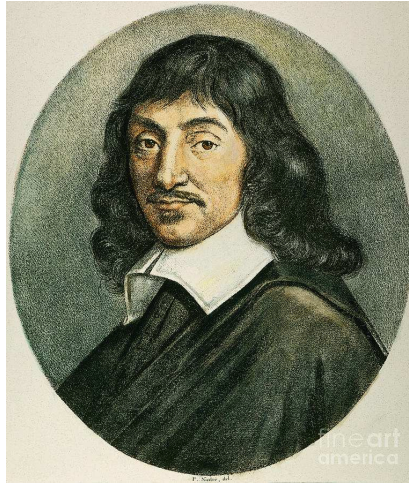
Усі уявлення про ансамблі елементарних частинок у квантовій механіці засновані на експериментальних фактах. Із цієї причини в абсолютній більшості випадків не можна відповісти на питання «чому так?». Наприклад, із експерименту витікає, що електромагнітна хвиля може обмінюватися з речовиною енергією лише квантами енергії. Тому електромагнітну хвилю можна розглядати як потік деяких частинок (фотонів) із енергією E_{ph} й імпульсом p_{ph}

$$E_{ph} = \hbar\omega, \quad p_{ph} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar|\mathbf{k}|, \quad (1)$$

де c - швидкість світла. Ці вирази пов'язують енергію та імпульс фотону з частотою ω й хвильовим вектором \mathbf{k} відповідної йому плоскої монохроматичної хвилі з напруженістю електричного поля

$$E(\mathbf{r}, t) = E_0 \exp(i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})). \quad (2)$$

Хвильові властивості фотона проявляються в експериментах із дифракції й інтерференції. Таким чином, електромагнітні хвилі мають одночасно хвильові й корпускулярні властивості. (**Корпускула** (англ. *corpuscle*, нім. *Korpuskelen*) — узагальнена назва дрібненьких частинок матерії. Гіпотеза про те, що матерія складається з корпускул була популярна в 17 ст. — 18 ст.. Серед її прихильників були такі вчені як Рене Декарт, Джон Локк та інші.

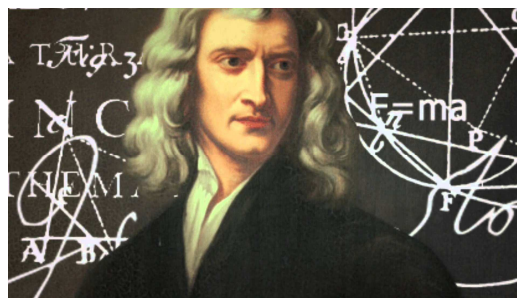


Ренé Декáрт (фр. *René Descartes*, лат. *Renatus Cartesius* — **Ренат Картезий**; 31 березня 1596, Ла-Е-ан-Турен (фр. *La Haye en Touraine*) (зараз місто Декарт), департамент Ендр і Луара, Франція — 11 лютого 1650, Стокгольм) — французький філософ, фізик, фізіолог, математик, основоположник аналітичної геометрії. У математиці Декарт запровадив декартову систему координат, дав поняття змінної величини і функції, ввів багато алгебраїчних позначень. У фізиці він сформулював закон збереження кількості руху, запровадив поняття імпульсу сили. Декарт — автор методу радикального сумніву в філософії, механіцизму у фізиці, ввів у науковий обіг поняття рефлексу.



Джон Лок (англ. *John Locke*, 1632, Рінгтон, Сомерсет, Королівство Англія — 1704, Ессекс, Королівство Англія) — англійський філософ, один із основних представників англійського емпіризму та Просвітництва.

Поняття корпускули близьке до поняття атома з тою відмінністю, що атоми вважалися неподільними, тоді як вважалося, що корпускули могли ділитися. Запропонована Ньютоном корпускулярна теорія світла вважала, що світло це потік дрібних частинок речовини, хоча сам вчений припускав і хвильову природу світла).



Сер Ісаак Ньютон (англ. *Sir Isaac Newton* (сер Айзек Ньютон) (4 січня 1643, Вулсторп, Лінкольншир, Королівство Англія — 31 березня 1727, Лондон, Великий Лондон, Англія, Королівство Великої Британії) — англійський науковець, який заклав основи сучасного природознавства, творець класичної фізики та один із засновників числення нескінченно малих. У книзі «Математичні начала натуральної філософії» Ньютон сформулював закони руху, відомі як закони Ньютона й закон всесвітнього тяжіння, які стали основою наукового світогляду впродовж трьох наступних століть і мали великий вплив не тільки на фізику, а й на філософію. Використовуючи свою теорію Ньютон зумів пояснити закони Кеплера, що описують рух планет навколо Сонця, чим заперечив останні сумніви щодо геліоцентричної системи світобудови.

Зміст функції $E(\mathbf{r}, t)$, якщо розглядати хвилі як потоки фотонів, полягає в наступному. Очевидно, що густина енергії хвилі W не повинна залежати від того, як цю хвилю розглядати. З одного боку, як ми знаємо, густина енергії хвилі W пропорційна квадрату модуля напруги електричного поля:

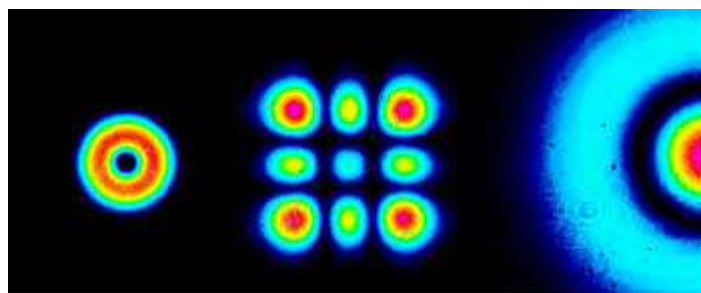
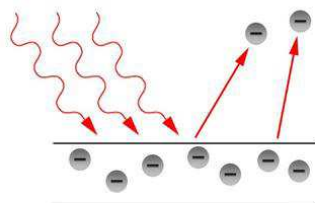
$$W \sim |E(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (3)$$

У корпускулярній же інтерпретації густина енергії пропорційна густині фотонів N_{ph} :

$$W \sim N_{ph}. \quad (4)$$

Отже, густина фотонів пропорційна квадрату модуля напруженості електричного поля:

$$N_{ph}(\mathbf{r}, t) \sim |E(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (5)$$



Звідси витікає, що за дифракції й інтерференції розподіл густини фотонів на екрані повинен відповідати розподілу густини енергії в дифрагуючій хвилі. Тобто, максимуму $E(\mathbf{r}, t)$ повинен відповідати максимум $N_{ph}(\mathbf{r}, t)$. Але ж ніяким експериментом не можна зафіксувати дробову частину енергії фотона. Тому лічильник фотонів (**Лічильник фотонів видимого світла** — це фотодетектор для підрахунку фотонів, заснований на провідності зони домішок у кремнії, легваному миш'яком. Вони мають високу квантову ефективність і здатні виявляти окремі фотони у видимому діапазоні електромагнітного спектру. Здатність підрахувати точну кількість виявлених фотонів надзвичайно важлива для квантового розподілу ключів) буде реєструвати або квант енергії $\hbar\omega$ або нічого. Ураховуючи, що напруженість електричного поля $E(\mathbf{r}, t)$ є величиною неперервною, а не дискретною, виникає питання про інтерпретацію (5). З неминучістю приходимо до висновку, що попадання фотону на екран необхідно трактувати як процес, причому його ймовірність визначається густиною енергії дифрагуючої хвилі. Іншими словами, величина $|E(\mathbf{r}, t)|^2$ визначає ймовірність знаходження фотона в даній точці простору.

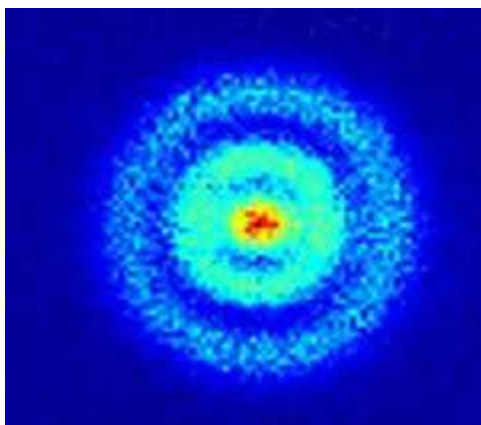
Аналогічно, потік електронів (частинок з енергією $\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ й імпульсом \mathbf{p}) дифрагує як плоска монохроматична хвиля. Це теж є експериментальним фактом. Поведінку вільного електрону по аналогії з фотоном також можна описати відповідною хвильовою функцією

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A_0 \exp(i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})), \quad (6)$$

де $\omega = \frac{\mathbf{p}^2}{2m\hbar}$ і $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$. Фізичний сенс функції $\psi(\mathbf{r}, t)$ полягає в тому, що квадрат її модуля

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi(\mathbf{r}, t)^* \psi(\mathbf{r}, t) \quad (7)$$

визначає ймовірність знаходження електрона в точці \mathbf{r} у момент часу t . Електрону як частинці ставиться у відповідність хвиля ймовірності, що називається **хвилею де Бройля** (довгий час було гіпотезою — **гіпотезою де Бройля**).



Таким чином, частинки мають хвильові, а хвилі – корпускулярні властивості. Це є так званий **квантово-механічний дуалізм** (використовується також словосполучення "**Корпускулярно-хвильовий дуалізм**"), який із неминучістю приводить до висновку, що у квантовій механіці частинки не є точковим об'єктом.

Зазвичай тип частинки та її стан визначаються постійними характеристиками – масою, зарядом і динамічними характеристиками: координатою, імпульсом, енергією, спіном. У класичній фізиці ці характеристики повністю визначають стан частинки як механічної системи. У квантовій же механіці на динамічні характеристики накладаються обмеження, пов'язані з принципом невизначеності Гайзенберга:

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar, \quad \Delta E \Delta t \sim \hbar. \quad (8)$$

Звідси видно, що дана обставина є відображенням того, що частинка у квантовій механіці не є точковим об'єктом. Іншими словами, точне одночасне завдання динамічних характеристик частинки неможливе і взагалі полишене сенсу. Співвідношення невизначеності (8) указує границю застосовності понять класичної фізики до квантових об'єктів.

Щоб поєднати дискретність та неперервність, у квантовій механіці вводять поняття «**поле**». Кожному сорту частинок відповідає певне поле. Наприклад, фотонам – електромагнітне поле, електронам і позитронам – електрон-позитронне поле, мезонам – мезонне поле і т.д. Поле як просторово неперервне середовище може також розглядатися як деяка динамічна система, що може знаходитись у різних дискретних імпульсно-енергетичних станах. Найнижчій стан цієї системи називається **вакуумом поля**. Це особливий стан матерії, за якого частинки є відсутніми. Поява частинок на фоні вакууму називається його **збудженням**. Збудження відбувається дискретно, шляхом появи окремих порцій, квантів, енергії та імпульсу. Кванти енергії називаються елементарними збудженнями полів. Саме такі збудження й визначаються як частинки. Енергія елементарних збуджень визначають масу частинки:

$$E = mc^2. \quad (9)$$

Але кінетична енергія пов'язана із імпульсом частинки. Найнижче значення енергії збудження відповідає імпульсу $p=0$. Це і є мінімальна енергія, необхідна для народження частинки. Нею визначається маса спокою частинки.

Енергія народження пари збуджень електрон-позитронного поля (електрона й позитрона) складає приблизно 1 Мев, що відповідає масі спокою електрона $m_0 \sim 10^{-30}$ кг. Енергія збудження електромагнітного поля починається з нуля. Це значить, що маса спокою фотона дорівнює нулю.

Різні поля можуть обмінюватися енергією, тобто, взаємодіяти одне з одним. Ця взаємодія визначає сили, з якими частинки діють одна на одну. Параметр, що характеризує взаємодію полів, називається їх **зарядом**. У залежності від того, з яким полем розглядається взаємодія, можна говорити про електричний заряд (при взаємодії з електричним полем), мезонний заряд (при взаємодії з мезонним полем) і т.д. Отже, елементарні частинки можна розглядати як **елементарні збудження** кванових полів.

Динамічні рівняння для частинок.

Як ми знаємо, напруженість електричного поля плоскої монохроматичної хвилі задовольняє хвильове рівняння:

$$\Delta E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2}, \quad (10)$$

де $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2}$ - оператор Лапласа. У загальному випадку електромагнітне поле описується рівняннями Максвелла. Рівняння Максвелла є динамічними рівняннями електромагнітного поля. Вони так називаються через те, що описують динаміку, тобто, розвиток або еволюцію поля в часі. Динамічні рівняння можна ще називати рівняннями руху для поля чи рівняннями еволюції. У силу викладеного вище, повинні існувати й рівняння, які описують динаміку елементарних частинок у квантовій механіці. Нам відомий приклад такого рівняння – це рівняння Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (11)$$

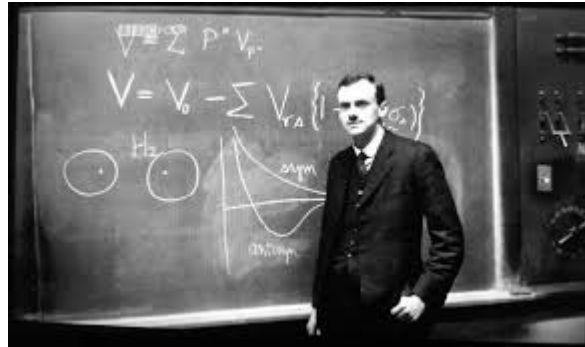
де \hat{H} - оператор Гамільтона для частинки, або гамільтоніан. Це рівняння часто записують у вигляді:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (12)$$

де $V(\mathbf{r})$ - зовнішня по відношенню до частинки потенціальна енергія. Якщо мова йде про електронно-позитронне поле, то воно описується рівняннями Дірака

$$(\alpha \cdot p + \beta mc^2) \varphi = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t}$$

Поль Андре Марі Дірак – людина, «що придумала» антисвіт.



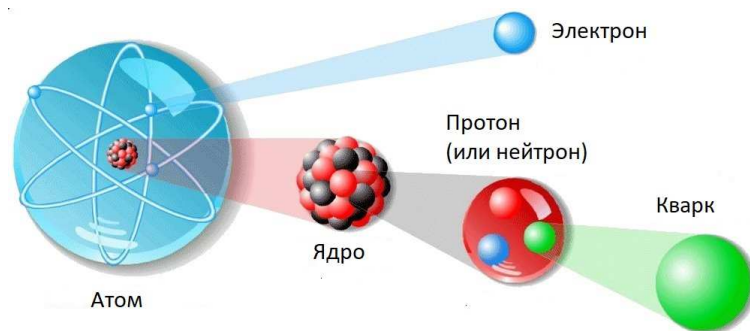
Треба зазначити, що він був у ХФТІ, виступав із доповідями... Тривалий час на старому майданчику в ХФТІ зберігалася дошка з формулами, які Дірак писав під час доповіді. На превеликий жаль наразі, наскільки відомо, дошку втрачено. Шкода, звичайно, але ж і «фетишистами» не слід бути теж, як кажуть, «не сотвори собі кумира».

Про інші види динамічних рівнянь для систем частинок у квантовій механіці мова ще йтиме пізніше.

Отже – головний висновок: Корпускулярно-хвильова природа частинок приводить до того, що утворена цими частинками речовина в конденсованому стані є синтезом дискретного й неперервного. Корпускулярні й хвильові уявлення можна назвати двома проекціями властивості матерії, двома сторонами однієї й тієї ж реальності.

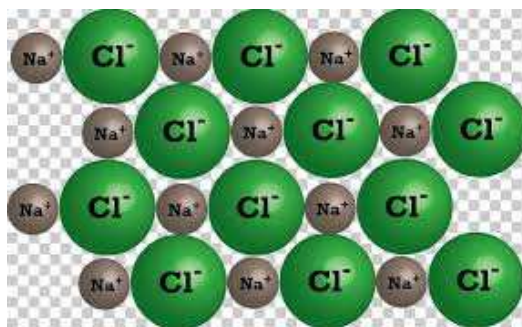
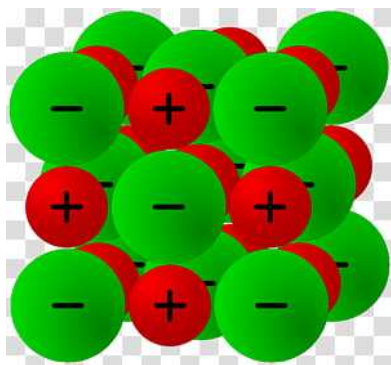
Структурні одиниці речовини.

Поговоримо тепер про існування певної ієрархії в організації структури конденсованої речовини. Наприклад, якщо говорити про атоми як про складові «цеглинки» речовини, то ми ж можемо згадати, що кожен із них також складається з електронної оболонки та ядра.



Далі, як ми знаємо, ядра утворюються нуклонами (нейтронами й протонами). У відповідності з уявленнями сучасної фізики протони й нейтрони складаються з кварків і глюонів. Таким чином, ядра є складними системами, що містять велике число кварків, глюонних і мезонних полів, взаємодійних між собою. Однак при вивченні конденсованих систем суттєвими є тільки макроскопічні параметри ядер, унаслідок чого можна обмежитися тільки загальноприйнятою нуклонною моделлю. Ядра з електронними оболонками утворюють атоми, атоми – молекули. Виникає питання: а чи завжди треба виходити з первинної картини, тобто, розглядати речовину як сукупність усіх елементарних частинок? Чи можна обмежитись розглядом більш складних утворень (наприклад, ядер, атомів, молекул) і вже з них будувати опис речовини? Як установити межу між більш простими й більш складними об'єктами? Ця межа визначається поняттям «структурна одиниця» речовини. Частинки, які можна розглядати як «елементарні» в теорії конденсованих середовищ, будемо називати **структурними одиницями речовини**. Під структурними одиницями речовини будемо розуміти частинки або комплекси частинок, енергія утворення яких суттєво перевищує енергію взаємодії між ними та кінетичну енергію їх руху. Під енергією утворення розуміється: для окремих частинок – енергія, необхідна для їх народження (по-суті, як ми бачили, енергія елементарного збудження вакуума), для багаточастинкових комплексів – енергія зв'язку частинок у них.

Якщо вихідними структурними одиницями речовини є атоми або молекули, то енергія зв'язку електрона з ядром або атомів у молекулах повинна бути більшою кінетичної енергії їх руху й енергії їх взаємодії. За такої умови зберігається індивідуальність атомів чи молекул в усьому інтервалі температур, в якому ця речовина існує. Але якщо за конденсації сили взаємодії настільки великі, що індивідуальність атомів чи молекул губиться, то їх уже не можна розглядати як структурні одиниці речовини. Прикладом може слугувати кристал звичайної солі NaCl. У цьому кристалі іон Na одночасно пов'язаний із 8 іонами Cl. Кристал NaCl є гігантським утворенням, структурними одиницями якого є не атоми Na і Cl, а їх іони.



Інший приклад – метали. Колективізовані електрони утворюють електронну рідину, яка заповнює ґратку, утворену зарядженими іонними остовами

Однак енергія народження електрона й позитрона та енергія розщеплення ядра завжди більша енергії зв'язку електронів та ядер у будь-яких речовинах (крім речовин за екстремальних умов, наприклад, ядерної матерії). Тому ядра й електрони завжди є структурними одиницями речовини. Структурними одиницями ядер є нейтрони й протони (нуклони), оскільки енергії їх народження (наприклад, енергія народження пари протон - антипротон) набагато більша за енергію взаємодії нуклонів у ядрі. Однак, енергія переходу нуклона із нейтрального до зарядженого стану менша за енергію зв'язку нуклонів у ядрі. Тому приписувати кожному нуклону заряд, тобто, індивідуалізувати нейтрони й протони у ядрі, не можна. Строго кажучи, слід розглядати ядро як систему нуклонів із певним загальним зарядом.

Розгляд конденсованого стану речовини як ансамблю структурних одиниць суттєво спрощує задачу опису.

Роль структурних одиниць у формуванні властивостей конденсованих середовищ

Властивості конденсованих середовищ визначаються:

1. Властивостями ядер атомів.
2. Структурою електронних оболонок атомів.
3. Силами взаємодії між структурними одиницями.
4. Статистикою, що описує поведінку ансамблів структурних одиниць.

Ядра.

Найважливішими характеристиками ядер як структурних одиниць речовини є маса (що визначається числом нуклонів), заряд (умовно число протонів), механічний момент кількості руху $L_N = \hbar I$, спін (I - ядерне спінове число), що є векторною сумою спінів нуклонів та їх орбітальних моментів. Спіни нейтронів і протонів дорівнюють $\hbar/2$. Орбітальні моменти приймають тільки значення, кратні \hbar . Таким чином, ядра, які складаються із непарного числа нуклонів, мають напівцілі спіни ($I = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$) і підпорядковуються статистиці Фермі-Дірака, а із парного числа нуклонів – цілі спіни ($I = 0, 1, 2, \dots$) і підпорядковуються статистиці Бозе-Ейнштейна, про що поговоримо ще не раз нижче. Зазначимо, що спін, рівний нулю ($I = 0$) мають ядра, які складаються із однакового числа протонів і нейтронів.

Діаметр ядра має порядок 10^{-15} м. На таблиці наведено основні характеристики електронів, нейтронів і протонів.

Частинка	Маса		Заряд, Кл	Спін, \hbar
	кг	а.о.м.		
Електрон	$9,109 \cdot 10^{-31}$	0,0005486	$-1,6022 \cdot 10^{-19}$	1/2

Протон	$1,673 \cdot 10^{-27}$	1,00728	$+1,6022 \cdot 10^{-19}$	1/2
Нейтрон	$1,675 \cdot 10^{-27}$	1,00867	0	1/2

Ядро з $I \neq 0$ має магнітний дипольний момент μ_N , пропорційний спіну ядра

$$\mu_N = \gamma \hbar I, \quad (13)$$

Ядерне гіромагнітне відношення γ - відношення магнітного моменту ядра до його моменту кількості руху L_N прийнято виражати через одиницю гіромагнітного відношення

$$\gamma_0 = e/2m_p \quad (14)$$

(e і m_p - заряд і маса протона відповідно). Тоді

$$\gamma = g\gamma_0,$$

де g - ядерний фактор Ланде, і

$$\mu_N = g\gamma_0 \hbar I = g\mu_B^N I. \quad (15)$$

Величина

$$\mu_B^N = \frac{e\hbar}{2m_p c}$$

називається ядерним магнетоном ($\mu_B^N = 5,05 \cdot 10^{-24}$ ерг/Гс). Дипольний магнітний момент μ_N зазвичай вимірюється в ядерних магнетонах μ_B^N .

Із наявністю спіну та ядерного магнітного моменту пов'язані: 1) ядерний магнетизм, 2) магнітна взаємодія з магнітним моментом електронів на орбітах атомів, що викликає надтонке розщеплення енергетичних рівнів цих електронів.

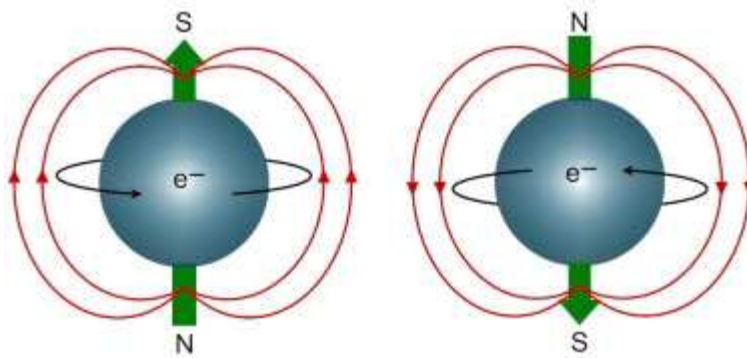
В основному, не збудженому стані густина електричного заряду ядра – парна функція координат. Тому постійний електричний дипольний момент ядра в цьому стані дорівнює нулю. Однак усі ядра з $I \geq 1$ мають електричний квадрупольний момент. Квадрупольний момент пов'язаний із відхиленням форми ядра (просторового розподілу заряду) від сферичної й зростає зі збільшенням розміру ядра. При $I < 1$ ядра мають сферичну симетрію, і їх електричний дипольний момент дорівнює нулеві.

Взаємодія електричного квадрупольного моменту з неоднорідним внутрішнім електричним полем призводить до зняття виродження енергетичних станів, відповідного різній орієнтації ядерного спіну відносно електричного поля. Це є причиною ядерного квадрупольного резонансу, який спостерігається за відсутності зовнішнього магнітного поля, на відміну від ядерного магнітного резонансу, в якому розщеплення енергетичного рівня ядра викликається зовнішнім магнітним полем.

Крім того, взаємодія електричних квадрупольних моментів ядер з електронами викликає так зване надтонке розщеплення енергетичних рівнів електронів в атомах і молекулах.

Заряд ядра визначає величину релятивістських ефектів у речовині, зокрема, енергію спин-орбітальної взаємодії. Спин-орбітальна взаємодія – взаємодія власного магнітного моменту електрона з магнітним полем, утвореним орбітальним рухом електронів. Потенціальна енергія цієї взаємодії називається енергією спин-орбітального зв'язку. Вона визначається швидкістю v руху електрона й пропорційна $(v/c)^2$. Оскільки швидкість руху електрона в атомі визначається зарядом ядра, енергія спин-орбітальної взаємодії більша у важких атомів. Як наслідок спин-орбітальної взаємодії стани електрону з різними проекціями спін у відрізняються своєю енергією (спин-орбітальне розщеплення).

Розглянемо детальніше спин-орбітальну взаємодію в атомі. В атомі завжди є внутрішнє магнітне поле, яке утворюється орбітальним рухом електронів навколо ядра. Розглянемо електрон, що рухається в атомі по круговій орбіті із швидкістю v навколо ядра із зарядом eZ .



У системі координат, пов'язаній з електроном, ядро рухається навколо електрону зі швидкістю $-\mathbf{v}$. Тим самим породжується струм $-Ze\mathbf{v}$. Магнітне поле \mathbf{H} цього струму в точці, де знаходиться електрон, дорівнює

$$\mathbf{H} = -\frac{Ze}{cr^3}[\mathbf{r}, \mathbf{v}] = -\frac{Ze}{m_0 cr^3}\mathbf{l}, \quad (16)$$

де $\mathbf{l} = [\mathbf{r}, \mathbf{p}]$ - орбітальний момент імпульсу електрона.

Енергія взаємодії W спінового магнітного моменту електрона

$$\mathbf{M} = -e\mathbf{S}/m_0c$$

(\mathbf{S} - спін електрона) з магнітним полем \mathbf{H} у системі відліку, пов'язаній із електроном, запишеться у вигляді:

$$W = -(\mathbf{M}\mathbf{H}) = \frac{e}{m_0c} \frac{Ze}{m_0cr^3}(\mathbf{S}\mathbf{l}) = \frac{Ze^2}{m_0^2c^2r^3}(\mathbf{S}\mathbf{l}). \quad (17)$$

У вихідній системі відліку після перетворень Лоренца з'являється множник $1/2$. Розглянемо далі вираз

$$\frac{(\mathbf{S})}{r^3} = \frac{[\mathbf{r}, \mathbf{p}]\mathbf{S}}{r^3}. \quad (18)$$

Якщо згадати далі, що кулонівський потенціал визначається формулою:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r},$$

із-за чого його градієнт має вигляд:

$$\nabla U(r) = \frac{Ze^2 \mathbf{r}}{r^3},$$

то

$$\frac{\nabla U(r)}{Ze^2} = \frac{\mathbf{r}}{r^3}.$$

Підставляючи цей вираз до (18), здобудемо

$$\frac{(\mathbf{S})}{r^3} = \frac{[\nabla U(r), \mathbf{p}]\mathbf{S}}{Ze^2},$$

З урахуванням чого вираз для енергії W набуває вигляд:

$$W = \frac{Ze^2 [\nabla U(r), \mathbf{p}]\mathbf{S}}{2m_0^2 c^2 Ze^2} = \frac{[\nabla U(r), \mathbf{p}]\mathbf{S}}{2m_0^2 c^2}. \quad (19)$$

Для електрона $S = \hbar/2$. Таким чином, енергія спин-орбітальної взаємодії виникає внаслідок руху електрону відносно ядра: електрон рухається в електричному полі ядра. Тому і в кристалі спин-орбітальна взаємодія є наслідком руху електрона в неоднорідному електричному полі ґратки (яка складається іонами).

Схема розрахунку в такому випадку також застосовна, якщо замінити центральне поле атома в виразі (19) періодичним полем кристалу. У загальному випадку W визначається величиною градієнта потенціалу.

Електронна оболонка атомів.



Структура електронної оболонки атомів визначає:

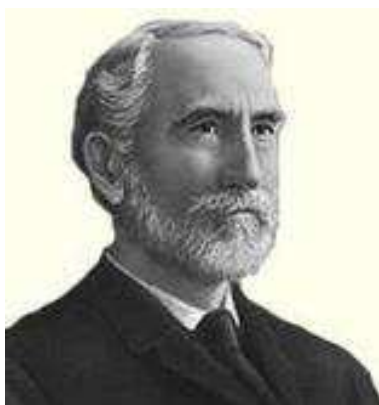
1. Структуру хімічних зв'язків, їх енергію та взаємну орієнтацію, і, як правило, структуру кристалу.
2. Магнітний орбітальний момент і спіновий магнітний момент атомів.
3. Структуру енергетичних рівнів та оптичні властивості атомів.

Статистика ансамблів структурних одиниць.

Статистика визначає характер розподілу частинок за енергетичними станами. Якщо частинки мають напівцілий спін, то вони підкоряються статистиці Фермі-Дірака й принципу Паулі, у відповідності з яким у кожному стані із заданим значенням імпульсу та проекції спіну може знаходитися лише одна частинка. Частинки із цілим спіном описуються статистикою Бозе-Ейнштейна. При цьому в кожному стані може знаходитись будь-яка кількість частинок. При розподілі Фермі-Дірака ймовірність f_{E_n} знаходження частинки у стані з енергією E_n (можна також говорити про число частинок n_E у стані з енергією E_n) при температурі T описується функцією

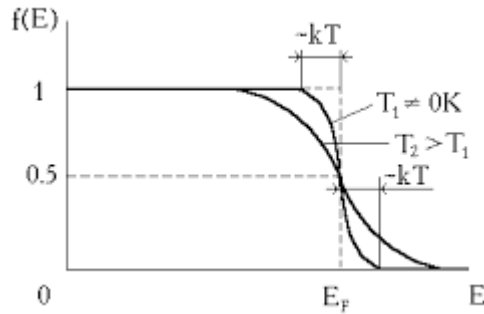
$$f_{E_n} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_n - \mu}{k_b T}\right) + 1}, \quad (20)$$

де μ - хімічний потенціал, k_b - постійна Больцмана. **Хімічний потенціал** — один з термодинамічних параметрів системи; енергія додавання однієї частки в систему без здійснення роботи. Поняття хімічного потенціалу запровадив 1875 року Джозая Віллард Гіббс. Одиницею вимірювання хімічного потенціалу в системі SI є Дж/моль.



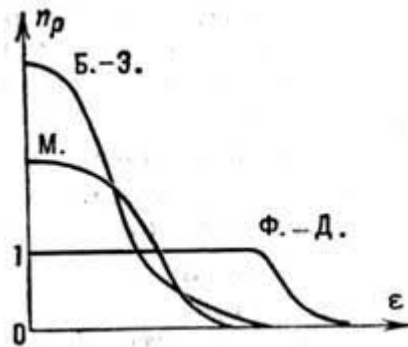
Джозая Віллард Гіббс (англ. *Josiah Willard Gibbs*, *Джовсая Вілард Гібз*; 11 лютого 1839, Нью-Гейвен, США — 28 квітня 1903, там само) — американський математик та фізик, один із засновників векторного аналізу та математичної теорії термодинаміки.

При $E_n < \mu$ і $T = 0$ $f_{E_n} = 1$, тобто, всі стани з такою енергією заповнені. При $E_n > \mu$ і $T = 0$ всі стани вільні. Такий розподіл є наслідком двох вимог – мінімальності енергії та принципу Паулі. Енергія E_F , відповідна межі заповнених станів, називається енергією Фермі. У загальному випадку енергію Фермі можна визначити як енергію, за якої $f_{E_n} = 1/2$, тобто, $E_F = \mu$. При $T > 0$ розподіл Фермі «розмазується» (рисунок).

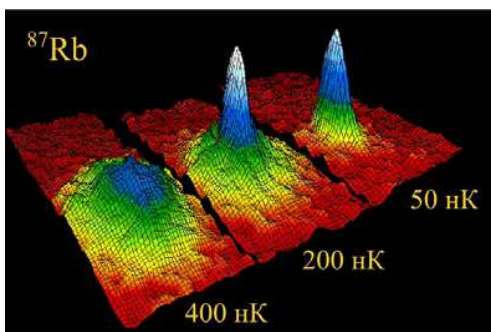


При розподілі Бозе-Ейнштейна ймовірність частинці знаходитись у стані з енергією E_n виражається формулою

$$f_{E_n} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_n - \mu}{k_b T}\right) - 1}. \quad (21)$$



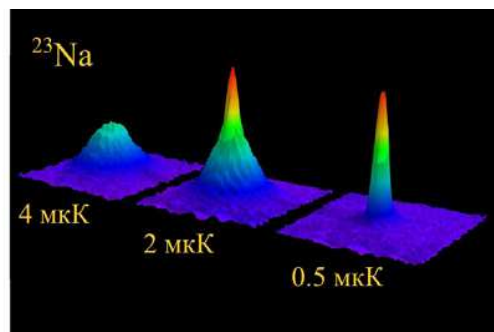
При $E_n > \mu$ і $T = 0$ $f_{E_n} = 0$, а при $E_n \rightarrow \mu$ $f_{E_n} \rightarrow \infty$ (бозе-ейнштейнівська конденсація).



Е. Корнелл



К. Віман



В. Кеттерле

Перші експериментальні результати двох груп (портрети лідерів) із спостереження Бозе-Ейнштейнівської конденсації в 1995 році

При наявності взаємодії (сил відштовхування) конденсація всіх частинок на найнижчому рівні (тобто, в одному й тому ж стані) стає не вигідним енергетично, оскільки велика густина частинок в одному стані приводить до збільшення потенціальної енергії взаємодії за рахунок сил відштовхування. Енергетично вигідно, щоби густина станів в основному стані зменшилась, і потенціальна енергія понизилась за рахунок переходу частинок до більш високих енергетичних станів. Прийнято говорити, що взаємодія призводить до виснаження бозе-ейнштейнівського конденсату.

Статистика ансамблів визначає практично всі властивості конденсованих станів: теплоємність, теплопровідність, електропровідність, магнетизм.

Сили взаємодії.

Сили взаємодії визначають:

1. Структуру.
2. Жорсткість системи.
3. Характер спектру коливань частинок у конденсованому середовищі.
4. Для заряджених частинок (наприклад, іонів та електронів у металах) одна система поляризує іншу, що призводить до виникнення нового типу взаємодії, характерного для конденсованих середовищ – поляризаційних сил.

Зокрема, з такою взаємодією пов'язане явище надпровідності (куперівські пари)

