

Жусупов М.А.¹, Турсынбаева Д.А.², Жаксыбекова К.А.¹, Кабатаева Р.С.¹

¹Казахский национальный университет имени аль-Фараби, НИИЭТФ,
кафедра теоретической и ядерной физики, г. Алматы, Казахстан

²Казахский национальный педагогический университет имени Абая,
кафедра методики преподавания математики, физики и информатики,
г. Алматы, Казахстан, e-mail: raushan.kabatayeva@gmail.com

МЕТОДИКА ВЫПОЛНЕНИЯ КВАНТОВЫХ РАСЧЕТОВ

В настоящей статье рассматривается методика использования константы конверсии и постоянной тонкой структуры в квантовых расчетах. Знание данной методики необходимо для молодых преподавателей и исследователей в области теоретической ядерной и атомной физики, а также студентов, магистрантов и докторантов. Показано, как с помощью константы конверсии и постоянной тонкой структуры можно выполнять квантовые расчеты, таким образом, чтобы получать в результате величины необходимой размерности. Рассмотрено несколько случаев, такие как расчет энергетических уровней и энергии ионизации водородоподобных атомов, вычисление радиуса первой боровской орбиты для атома водорода, массы квантов сильного взаимодействия и радиуса слабых взаимодействий, расчет полной и кинетической энергий для релятивистских частиц. В литературе по субатомной физике встречается много других случаев, когда без использования этих констант невозможно получить порядок и размерность искомой величины. Рассмотренные примеры знакомят читателя с единицами микромира, а также дают глубокое понимание тем, кто уже имеет опыт работы в мире субатомных единиц. Постоянная тонкой структуры является безразмерной единицей, но она имеет глубинный смысл, поскольку все основные свойства и характеристики объектов микромира определяются этой величиной.

Ключевые слова: константа конверсии, постоянная тонкой структуры, квантовый расчет, субатомные единицы, водородоподобный атом, квант взаимодействия, радиус взаимодействия.

Zhusupov M.A., Tursynbayeva D.A., Zhaksybekova K.A., Kabatayeva R.S.

¹al-Farabi Kazakh National University, NIETF,

Department of Theoretical and Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²KazNPU them. Abay, Department of Methods of Teaching Mathematics, Physics and Informatics,
Almaty, Kazakhstan, E-mail: raushan.kabatayeva@gmail.com

Methodology of quantum calculations

In present article a methodology of conversion constant and fine structure constant's use in quantum calculations is considered, knowledge of the methodology is necessary for young teachers and researchers in field of theoretical nuclear and atomic physics, and also for bachelor, master and PhD students. It is shown how using the conversion constant and fine structure constant one can do quantum calculations in such a way that to obtain as a result quantities of necessary dimensions. Several cases are considered, such as a calculation of energy levels and ionization energies of hydrogen-like atoms, calculation of radius of the first Bohr orbit for hydrogen-like atom, mass of strong interaction quanta and weak interaction radius, calculation of total and kinetic energies for relativistic particles. In a literature on subatomic physics there appear a lot of cases when without using these constants it is not possible to obtain orders and dimensions of quantities. The examples considered acquaintance the readers with micro-world units, and also give a deep understanding for those who have an experience in subatomic units. The fine structure constant is dimensionless, but it has a deep

meaning since all fundamental properties and characteristics of micro-world objects are defined by this quantity.

Key words: conversion constant, fine structure constant, quantum calculation, subatomic units, hydrogen-like atom, interaction quantum, interaction radius.

Жусупов М.А.¹, Турсынбаева Д.А.², Жаксыбекова К.А.¹, Кабатаева Р.С.¹

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, ЭТФҒЗИ,
теориялық және ядролық физика кафедрасы, Алматы қ., Қазақстан

²Абай атындағы Ұлттық педагогикалық университет, математика, физика және информатиканы оқыту
әдістеме кафедрасы, Алматы қ., Қазақстан, e-mail: raushan.kabatayeva@gmail.com

Кванттық есептеулерді орындау әдіснамасы

Нақты мақалада кванттық есептеулерде конверсия тұрақтысын және нәзік құрылым тұрақтысын қолдану методикасы қарастырылған, бұл методиканы білу теориялық ядролық және атомдық физика саласындағы жас оқытушыларға және зерттеушілерге аса қажетті, сонымен қатар студенттерге, магистранттарға және докторанттарға пайдалы болып табылады. Кванттық есептеулер нәтижесінде керекті өлшем бірлікті алу үшін конверсия тұрақтысын және нәзік құрылым тұрақтысын қолдану жолдары көрсетілген. Бірнеше жағдай қарастырылған, нақтылап айтқанда, сутегі тәрізді атомдардың энергетикалық деңгейлерін және ионизация энергиясын есептеу, сутегі атомы үшін бірінші бор орбитасын, күшті әсерлесу кванттарының массасын және әлсіз әсерлесу радиусын, релятивистік бөлшектер үшін толық және кинетикалық энергиясын есептеу. Субатомдық физика әдебиеттерінде керекті шаманың ретін және өлшем бірлігін табу үшін айтылған тұрақтыларының қолданбауысыз мүмкін емес екенін айқындайтын басқа да көптеген жағдайлар кездеседі. Қарастырылған мысалдар оқырманды микро әлемнің бірліктерімен таныстырады, және де субатомдық бірліктермен жұмыс тәжірибесі бар ізденушілерге де терең түсінігін береді. Нәзік құрылым тұрақтысы өлшембірліксіз болып табылады, бірақ оның терең мағынасы бар, себебі микро әлем объектілерінің негізгі қасиеттері және сипаттамалары дәл осы шамамен анықталады.

Түйін сөздер: конверсия тұрақтысы, нәзік құрылым тұрақтысы, кванттық есептеу, субатомдық бірліктер, сутегі тәрізді атом, әсерлесу кванты, әсерлесу радиусы.

Введение

Квантовые расчеты используются почти во всех областях современной науки и техники [1-6]. Понятие квантовых расчетов встречается в исследованиях по квантовой химии [7], квантовой информации [8], квантовой биологии [9], астрофизике [10] и многих других. Область квантовой химии пережила огромный прогресс за последние два десятилетия [7]. Двигателем к этому явились возможность все более и более мощного компьютерного обеспечения, развитие и внедрение улучшенных методик с улучшенным компромиссом между точностью и эффективностью расчетов, а также успешные применения этих методик к проблемам реального мира. Таким образом, квантовые расчеты стали существенным инструментом во многих областях химических исследований. В работе [7] дается обзор того, как квантовое химическое моделирование используется в химической промышленности, путем обзора статей, написанных авторами из химической промышленности. Различные темы специфической промышленной важности рассмотрены вместе с механизмами квантовых

расчетов. Как пример, это расчеты реакций термодинамики и кинетики, так как именно они являются ключевыми составляющими к пониманию и предсказанию химической реактивности.

В работе [8] дается описание основ теории квантовой информации и понятие квантовой запутанности, была предложена методология для модельного запутанного квантового расчета в области квантовых алгоритмов, также рассмотрены уровни запутанности в операции квантовых алгоритмов.

Глубокое понимание и проведение эффективных квантовых расчетов требует знания фундаментальных квантовых констант и понимание их физической сущности, а также навыков их применения в аналитических и численных расчетах. В расчетах в атомной и ядерной физике, физике элементарных частиц принято, используя соотношение Эйнштейна $E = Mc^2$, измерять массы частиц в единицах $MэВ/c^2$, или пользоваться величиной $Mc^2 [MэВ]$. Так, для электрона $m_e c^2 = 0.511 MэВ$, для протона и нейтрона $M_p c^2 = 938.27 MэВ$ и $M_n c^2 = 939.57 MэВ$ соответственно и т.д.

Конкретные расчеты в различных квантовых приложениях значительно упрощаются, если использовать не численные значения наиболее часто встречающихся фундаментальных постоянных, таких как e – абсолютное значение электрического заряда электрона, $\hbar = h/2\pi$, где h – постоянная Планка, c – скорость света в вакууме, а рассматривать их комбинации [11]. Такими являются константа конверсии $\hbar c = 1.97 \cdot 10^{-11} \text{ МэВ} \cdot \text{см}$ и постоянная тонкой структуры $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$. При этом для масс частиц употребляются энергетические единицы [МэВ]. Рассмотрим следующие примеры [12, 13].

Коэффициент конверсии в квантовых расчетах

1. Энергетические уровни и энергии ионизации водородоподобных атомов.

В этом случае энергетические уровни квантуются [11]:

$$E_n = -\frac{\mu z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Для атома водорода $z = 1$, μ – приведенная масса системы электрон-ядро:

$$\mu = \frac{m_e \cdot M_p}{m_e + M_p}.$$

Для атома водорода $\mu \approx m_e$, так как $\frac{m_e}{M_p} = \frac{1}{1836}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ – главное квантовое число.

Энергия ионизации (энергия связи) – это энергия, необходимая для отрыва электрона от атома в основном состоянии $I = -E_1 = \varepsilon_{\text{св.}}$ [11]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{св.}} &= \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = \frac{m_e c^2}{2} \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} = \\ &= \frac{0,511 \text{ МэВ}}{2} \frac{1}{137^2} = 13,6 \text{ эВ}. \end{aligned}$$

2. Радиус первой боровской орбиты для атома водорода a [11]:

$$\begin{aligned} a &= \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar^2 c^2}{m_e e^2 c^2} = \frac{\hbar c}{e^2} \frac{\hbar c}{m_e c^2} = \\ &= 137 \cdot \frac{1,97 \text{ МэВ} \cdot \text{см}}{0,511 \text{ МэВ}} = 0,528 \cdot 10^{-8} \text{ см}. \end{aligned}$$

Напомним, что в полуквантовой теории Бора боровский радиус a – это расстояние от ядра, на котором движется электрон. В квантовой механике боровский радиус a – это расстояние, на котором максимальна вероятность обнаружения электрона в основном состоянии атома.

3. Масса квантов сильного взаимодействия
Согласно современным представлениям взаимодействие между нуклонами осуществляется путем обмена между ними некоторыми частицами – квантами ядерного поля [12]. При этом на расстояниях $r \geq 0,8 \cdot 10^{-13} \text{ см}$ основную роль играет обмен π -мезонами. Связь между радиусом сил и массой переносчика взаимодействия можно получить, если использовать соотношение неопределенностей для энергии и времени

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar.$$

Оно показывает, на какую величину ΔE может измениться энергия системы за промежуток времени Δt . За счет энергии ΔE на короткое время Δt может образоваться

виртуальная частица с массой $m = \frac{\Delta E}{c^2}$, то есть

в квантовой механике допускается нарушение закона сохранения энергии на время Δt . Предполагая, что гипотетический квант взаимодействия движется со скоростью света и проходит за время Δt расстояние, равное радиусу действия ядерных сил $a = 1.5 \text{ фм}$, получим

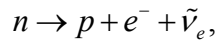
$$\begin{aligned} \Delta E &\approx \frac{\hbar}{\Delta t} = \frac{\hbar c}{c \cdot \Delta t} = \frac{\hbar c}{a} = \\ &= \frac{1,97 \cdot 10^{-11} \text{ МэВ} \cdot \text{см}}{1,5 \cdot 10^{-13} \text{ см}} \approx 130 \text{ МэВ}. \end{aligned}$$

Эта масса очень близка к массе π -мезонов. Таким образом, на расстояниях $r \geq 0,8 \text{ фм}$ заряженные π^\pm - и нейтральные π^0 -мезоны описывают взаимодействие между pp , nn и pp -парами. На меньших расстояниях между

нуклонами происходит обмен более тяжелыми ρ , η и ω -мезонами.

4. Радиус слабых взаимодействий.

Слабые взаимодействия ответственны за бета-распады атомных ядер, за распады нестабильных элементарных частиц. Например, нейтроны распадаются по следующей схеме [12]:



здесь $\tilde{\nu}_e$ – электронное антинейтрино. Квантами слабых взаимодействий являются промежуточные W - и Z -бозоны, впервые обнаруженные в ЦЕРНЕ в 1983 году. Их массы $M_W = 80,22 \text{ ГэВ}$ и $M_Z = 91,19 \text{ ГэВ}$.

Используя те же соображения, что и в предыдущем пункте, получим:

$$R_W = \frac{\hbar c}{M_W c^2} = \frac{1,97 \cdot 10^{-11} \text{ МэВ} \cdot \text{см}}{80220 \text{ МэВ}} \approx 2,5 \cdot 10^{-16} \text{ см}.$$

5. Определить полную E и кинетическую T энергии электрона, приведенная длина волны которого равна $\tilde{\lambda} = 10^{-2} \phi_m$.

$$\tilde{\lambda} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar c}{pc}.$$

Для рассматриваемых длин волн электроны являются высокоэнергетичными. Для их энергий используем релятивистскую формулу [13]

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

$$pc = \sqrt{E^2 - m^2 c^4}$$

Тогда

$$\sqrt{E^2 - m^2 c^4} = \frac{\hbar c}{\tilde{\lambda}} = \frac{1,97 \cdot 10^{-11} \text{ МэВ} \cdot \text{см}}{10^{-2} \cdot 10^{-13} \text{ см}} = 2 \cdot 10^4 \text{ МэВ} = 20 \text{ ГэВ}.$$

Поскольку $E = mc^2$, то $E \approx T = 20 \text{ ГэВ}$. Подобные энергии электронов легко достижимы на ускорителях в ЦЕРНе.

Литература

- 1 Pacios L.F. A program to test basis-sets for quantum calculations with the option to include effective core potentials // Computer Physics Communications. V. 67. No. 2. P. 309-324. 1991.
- 2 Balucani N., Skouteris D., Cartechini L., Capozza G., Segoloni E., Casavecchia P., Alexander M.H., Capecchi G., Werner H.J. Differential cross sections from quantum calculations on coupled ab initio potential energy surfaces and scattering experiments for Cl(P-2)+H-2 reactions // Physical Review Letters. V. 91. No. 1. 013201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.013201. 2003.
- 3 Miroshnichenko G.P. Discrete photodetection for protocols of linear optical quantum calculations and communications // Journal of Experimental and Theoretical Physics. V. 112. No. 6. P. 923-931. DOI: 10.1134/S1063776111050141. 2011.
- 4 Simenel C., Chomaz P., de France G. Quantum calculations of Coulomb reorientation for sub-barrier fusion // Physical Review Letters. V. 93. No. 10. 102701. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.102701. 2004.
- 5 Bovino S., Wernli M., Gianturco F.A. Fast LiH destruction in reaction with H: quantum calculations and astrophysical consequences // Astrophysical Journal. V. 699. No. 1. P. 383-387. DOI: 10.1088/0004-637X/699/1/383. 2009.
- 6 Costantini A., Lago N.F., Lagana A., Huarte-Larranaga F. A Grid implementation of direct quantum calculations of rate coefficients // Computational Science and its Applications – ICCSA 2009, PT II. Lecture Notes in Computer Science. V. 5593. P. 104. 2009. International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2009). Seoul, South Korea. 2009.
- 7 Deglmann P., Schaefer A., Lennartz C. Application of quantum calculations in the chemical industry-an overview // International Journal of Quantum Chemistry. V. 115. No. 3. P. 107-136. DOI: 10.1002/qua.24811. 2015.
- 8 Potapov V., Gushanskiy S., Guzik V., Polenov M. Development of methodology for entangled quantum calculations modeling in the area of quantum algorithms // Software Engineering Trends and Techniques in Intelligent Systems, CSOC 2017. V. 3. Advances in Intelligent Systems and Computing. P. 106-115. DOI: 10.1007/978-3-319-57141-6_12. 2017.
- 9 Suprun A.D., Shmeleva L.V. Current in the protein nanowires: quantum calculations of the base states // Nanoscale Research Letters. V. 11. No. 74. DOI: 10.1186/s11671-016-1269-0. Feb 9 2016.
- 10 Oliver M.A. Quantum calculations in a unique rest frame // Foundations of Physics Letters. V. 4. No. 4. P. 337-350. DOI: 10.1007/BF00665893. Aug 1991.
- 11 В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике, учебное пособие. – М. Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1981. – 648 стр.

- 12 Субатомная физика. Под редакцией Б.С.Ишханова. – Москва, МГУ, 1994. – 224 стр.
- 13 Д. Перкинс. Введение в физику высоких энергий. – Москва, Энергоатомиздат, 1991. – 429 стр.

References

- 1 Pacios L.F., Computer Physics Communications. V. 67. No. 2. P. 309-324. 1991.
- 2 Balucani N., Skouteris D., Cartechini L., Capozza G., Segoloni E., Casavecchia P., Alexander M.H., Capecchi G., Werner H.J., Physical Review Letters. V. 91. No. 1. 013201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.013201. 2003.
- 3 Miroshnichenko G.P., Journal of Experimental and Theoretical Physics. V. 112. No. 6. P. 923-931. DOI: 10.1134/S1063776111050141. 2011.
- 4 Simenel C., Chomaz P., de France G., Physical Review Letters. V. 93. No. 10. 102701. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.102701. 2004.
- 5 Bovino S., Wernli M., Gianturco F.A., Astrophysical Journal. V. 699. No. 1. P. 383-387. DOI: 10.1088/0004-637X/699/1/383. 2009.
- 6 Costantini A., Lago N.F., Lagana A., Huarte-Larranaga F. A, Computational Science and its Applications – ICCSA 2009, PT II. Lecture Notes in Computer Science. V. 5593. P. 104. 2009. International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2009). Seoul, South Korea. 2009.
- 7 Deglmann P., Schaefer A., Lennartz C., International Journal of Quantum Chemistry. V. 115. No. 3. P. 107-136. DOI: 10.1002/qua.24811. 2015.
- 8 Potapov V., Gushanskiy S., Guzik V., Polenov M., Software Engineering Trends and Techniques in Intelligent Systems, CSOC 2017. V. 3. Advances in Intelligent Systems and Computing. V. 575. P. 106-115. DOI: 10.1007/978-3-319-57141-6_12. 2017.
- 9 Suprun A.D., Shmeleva L.V., Nanoscale Research Letters. V. 11. No. 74. DOI: 10.1186/s11671-016-1269-0. Feb 9 2016.
- 10 Oliver M.A., Foundations of Physics Letters. V. 4. No. 4. P. 337-350. DOI: 10.1007/BF00665893. Aug 1991.
- 11 V.M.Galitsky, B.M.Karnakov, V.I.Kogan. Zadachi po kvantovoy mekhanike, uchebnoe posobie. (M. Nauka, Glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury, 1981). 648 p.
- 12 Subatomnaya fizika. Pod redaktsiei B.S.Ishkhanova. (Moskva, MGU, 1994), 224 p. (in russ)
- 13 D. Perkins. Vvedenie v fiziku vysokih energiy. (Moskva, Energoatomizdat, 1991), 429 p. (in russ).