МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

ЗАГАЛЬНА ФІЗИКА
Фізика атома. Розв’язання задач

Навчальний посібник

*Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для здобувачів ступеня бакалавра за освітньою програмою «Комп’ютерне моделювання фізичних процесів»
спеціальності 104 «Фізика та астрономія»*

Укладачі:
В.Ф. Русаков, В.Г. Пицюга, І.М. Іванова.

Електронне мережне навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2022

Рецензент *Савченко Д.В.*, д-р. фіз.-мат. наук, доцент кафедри загальної фізики та моделювання фізичних процесів КПІ ім. Ігоря Сікорського.

Відповідальний редактор Лінчевський І.В., доктор фізико-математичних наук, професор.

Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 3 від 27.01.2022 р.)
за поданням Вченої ради фізико-математичного факультету
(протокол № 01 від 18.01.2022 р.)

Електронне мережне навчальне видання

Укладачі:
Русаков Володимир Федорович, д-р. фіз.-мат. наук, професор,
Пицюга Володимир Григорович, канд. фіз.-мат. наук, доцент,
Іванова Ірина Михайлівна, канд. фіз.-мат. наук, доцент.

ЗАГАЛЬНА ФІЗИКА
Фізика атома. Розв’язання задач

Русаков В.Ф. Загальна фізика. Фізика атома. Розв’язання задач [Електронний ресурс]: навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» / В. Ф. Русаков, В.Г. Пицюга, І.М.Іванова – Електронні текстові данні (1 файл: 191 Кбайт). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 43 с.

Навчальний посібник містить теоретичний та практичний матеріал з дисципліни «Загальна фізика. Фізика атома». Метою посібника є ознайомлення студентів з загальними принципами і методами розв’язання задач з фізики атома Викладання матеріалу базується на класичному курсі загальної фізики Д.В. Сивухіна і відповідає вимогам силабусу відповідного кредитного модуля освітньої програми «Комп’ютерне моделювання фізичних процесів», спеціальності 104 «Фізика та астрономія». Найбільш складні питання детально пояснені.

Навчальний посібник буде корисним також для студентів фізичних та технічних спеціальностей під час вивчення курсу загальної фізики.

Реєстр. № 21 /22-304 Обсяг 2,3 авт. арк.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
проспект Перемоги, 37, м. Київ, 03056
https://kpi.ua
Свідоцтво про внесення до Державного реєстру видавців, виготовлювачів
і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 5354 від 25.05.2017 р.

ЗМІСТ

Вступ

Методичні вказівки призначені для самостійної роботи студентів старших курсів природничих спеціальностей вищих начальних закладів. Вміння розв'язувати задачі з фізики є одним із критеріїв оволодіння студентом знаннями фізичних законів і явищ. Але, як показує досвід, найбільші труднощі у студентів виникають при розв'язанні фізичних задач, з чого починати, що робити і в якому порядку. При розв'язанні задач важливо притримуватися такого порядку:

– уважно читати умову задачі до повного розуміння її змісту, для кращого розуміння задачі необхідно зробити рисунок або схему;

– зробити аналіз задачі – з'ясувати наявність формули, за якою можна розрахувати шукану величину, при відсутності такої формули, використати інші формули для складання системи рівнянь, з розв'язання якої можна знайти шукану величину, визначити фізичні закони, які можна використати в задачі для знаходження шуканої величини;

– розмірність фізичних величин задачі перевести в систему СІ, це необхідно для перевірки розмірності шуканої величини і правильності використаної формули;

– розв'язати задачу у загальному вигляді, перевірити розмірність, розрахувати числовий результат і оцінити його фізичну розумність.

Передбачається, що студенти засвоїли закони таких розділів фізики, як механіка, молекулярна фізика, електрика і магнетизм, оптика.

Розділи кредитного модуля, які представлені у посібнику:

1. Модель Бора – Резерфорда атома водню.
2. Корпускулярно – хвильовий дуалізм.
3. Рівняння Шредінгера, рух мікрочастинок у потенціальних полях.
4. Багатоелектронні атоми, спектральні терми.
5. Атом в магнітному полі (ефект Зеємана).
6. Рентгенівське випромінювання.

Таблиця найбільш вживаних у посібнику сталих.

Заряд електрона – $1{,}602 \cdot 10^{-19}$Кл	Радіус Бора $r_Б = 0{,}529 \cdot 10^{-10}$м
Маса електрона $9{,}109 \cdot 10^{-31}$кг	Стала Рідберга $R_\infty = 13{,}606$ еВ =
Маса протона $1{,}673 \cdot 10^{-27}$ кг	$= 21{,}797 \cdot 10^{-19}$ Дж
Маса нейтрона $1{,}675 \cdot 10^{-27}$ кг	Швидкість світла с = $2{,}998 \cdot 10^{8}$ м/с
$\varepsilon_0 = 0{,}885 \cdot 10^{-11}$ Ф/м	1еВ = $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Дж
$\mu_0 = 1{,}257 \cdot 10^{-6}$ Гн/м	Магнетон Бора $\mu_Б = 9{,}27 \cdot 10^{-24} \frac{Дж}{Тл}$
Стала Планка $\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с	Гіромагнітне відношення $\lvert \gamma \rvert =$ $= -879{,}35 \cdot 10^{8} \frac{Кл}{кг}$

Розділ 1.
Основні положення теорії Бора – Резерфорда атома водню.

Досліди по розсіюванню α–частинок на атомах дали можливість Е. Резерфорду зробити висновок, що атом складається з двох частин – одна дуже важка, має малий розмір (приблизно у 1000 разів менший ніж сам атом), та повинна мати позитивний заряд для того щоб атом був електронейтральним. Ця частина була названа ядром, друга – це від'ємно заряджені електрони, які обертаються навколо ядра. Але така модель протирічить одному із законів електродинаміки – оскільки рух по колу відбувається з прискоренням, то електрон повинен випромінювати енергію і з часом упасти на ядро. Н.Бор, взявши модель Резерфорда за основу, дещо змінив її. Він припустив, що електрон в атомі знаходиться у різних дискретних стаціонарних станах, в яких він не випромінює, а випромінює (поглинає) тоді і тільки тоді, коли переходить з одного стану (k – *ого*) в інший (n – *ний*). При цьому він використав гіпотезу М.Планка, що частинка може змінювати свою енергію квантами $\hbar\omega$. Бор записав систему рівнянь для електрона, що рухається в потенціальному електричному полі ядра, в найпростішому вигляді (нерухоме ядро знаходиться у початку системи координат, а електрон рухається у площині навколо ядра). Виходячи з цієї моделі можна отримати наступні формули.

Закон збереження енергії:

$$E = E_{кін.} + U = \frac{mv^2}{2} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{eq_1}{r}.$$

З II закону Ньютона маємо рівність кулонівської і відцентрової сил:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{eq_1}{r^2} = \frac{mv^2}{r}. \qquad (1)$$

Умова квантування борівської орбіти:

$$M = mvr = n\hbar.$$

де M-момент імпульсу.

Гіпотеза Планка:

$$\Delta E_{kn} = \hbar\omega_{kn} = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{kn}}.$$

Заряд ядра q_1 Резерфорд виміряв, він дорівнює $q_1 = Ze$, де Z – номер елемента в таблиці хімічних елементів, e, m – заряд і маса електрона, v, r – його швидкість і радіус орбіти, $n \neq к$ – номери станів електрона в атомі, які приймають значення 1,2,3,…∞. Маємо чотири рівняння і чотири невідомих E, r, v, λ, розв'язання цієї системи рівнянь дає наступні їх вирази:

$$E_n = -\ \frac{mZ^2e^4}{32\pi^2{\varepsilon_0}^2\hbar^2n^2}\,. \qquad (2)$$

$$V = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar n}\,. \qquad (3)$$

$$R = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2n^2}{mZe^2}\,. \qquad (4)$$

$$\lambda_{kn}^{-1} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3\hbar^3\varepsilon_0^2c}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right),\ n < k. \qquad (5)$$

З отриманих формул можна зробити наступні висновки:

– енергія електрона в атомі, його швидкість і радіус орбіти приймають дискретні значення (залежать від n);

– найбільшу за модулем енергію електрон має при $n = 1$;

– найменший радіус орбіти електрона при $n = 1$ називається радіусом Бора, він чисельно дорівнює $r_Б \approx 0{,}05$ нм;

– електрон атома водню ($Z = 1$) має найбільшу швидкість при $n = 1$.

– модель Бора–Резерфорда пояснила експериментальний спектр випромінювання, спектр випромінювання атому водню (формула (5)) дискретний і складається із серій ліній. Серія ліній, що лежить в ультрафіолетовому діапазоні, утворюється при переходах електрона із станів $к = 2,3,4,5,\ldots\ \infty$ у стан $n = 1$, це серія Лаймана, переходам електрона із $к = 3,4,5,\ldots$

∞ у $n = 2$ відповідає серія Бальмера, а із $к = 4,5,6,...\infty$ у $n = 3$ − серія Пашена, вона лежить в інфрачервоному діапазоні оптичного випромінювання.

Величина $\frac{me^4}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2} = 13,6\ еВ = R_\infty$ є сталою величиною, вона дорівнює енергії іонізації атому водню в основному стані і називається сталою Рідберга, отже тоді енергію електрона в атомі можна записати як:

$$\mathrm{E}_n = -\frac{Z^2R_\infty}{n^2}.$$

Експериментальна перевірка теорії моделі Бора-Резерфорда атома водню показала, що для повної відповідності теорії і результатів експерименту необхідно у формулах для енергії, радіуса орбіти електрона і довжини хвилі випромінювання масу електрона m замінити на приведену масу (врахувати рух ядра): $\mu = \frac{mM}{m+M}$, де M − маса ядра атома. Символ ∞ у R_∞ означає, що стала Рідберга розрахована для випадку, коли ядро атома знаходиться у стані спокою (нескінченно важке, див. рівняння Бора). Теорія Бора – Резерфорда атома водню справедлива для деяких іонів: He^+, Li^{++}, Be^{+++}, їх називають воднеподібними атомами.

Приклади розв'язання задач

Задача № 1. Знайти межі довжин хвиль ($\lambda_{min} \div \lambda_{max}$) випромінювання серії Пашена атомом водню та іоном гелію.

Пояснення до розв'язання задачі. Оскільки в задачі мова йде про випромінювання хвиль, то для розв'язання задачі вибираємо формулу (5) випромінювання атома водню

$$\lambda_{kn}^{-1} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3\hbar^3\varepsilon_0^2c}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right).$$

1. Для серії Пашена квантові числа n і k приймають такі значення: $n = 3$, а $к = 4,5,...\infty$.Таким чином, як видно з наведеної формули, найбільша довжина хвилі буде для чисел $n = 3$, $к = 4$, коли електрон переходить з четвертого енергетичного рівня на третій, а найменша довжина хвилі при $n = 3$, а $к = \infty$. Отже для атома водню маємо (Z =1):

$$\lambda_{max}^{-1} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3\hbar^3\varepsilon_0^2 c}\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{4^2}\right).$$

Звідси λ_{max}= 1859,5 нм.

$$\lambda_{min}^{-1} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3\hbar^3\varepsilon_0^2 c}\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{\infty^2}\right). \quad \lambda_{min} = 821{,}1 \text{ нм.}$$

Відповідь: серія Пашена атома водню лежить у межах $\lambda_{min} = 821{,}1$нм і λ_{max}= 1859,5 нм.

2. Для іона гелію (Z = 2) :

$$\lambda_{max}^{-1} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3\hbar^3\varepsilon_0^2 c}\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{4^2}\right). \quad \lambda_{max} = 469{,}2 \text{ нм.}$$

$$\lambda_{min}^{-1} = \frac{mZ^2e^4}{64\pi^3\hbar^3\varepsilon_0^2 c}\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{\infty^2}\right). \quad \lambda_{min} = 205{,}3 \text{ нм.}$$

Відповідь: серія Пашена іона гелію лежить в межах 205,3 нм і 469,2 нм., для водню – в межах 821,1нм. і 1859,5нм.

Задача № 2. Нерухомий іон гелію випромінює фотон, що відповідає третій лінії серії Лаймана. Знайти швидкість віддачі іона гелію.

Пояснення до розв'язання задачі. Третя лінія випромінювання серії Лаймана виникає при переході електрона зі стану $к$ = 4 у стан n = 1. Випромінений фотон має імпульс $\overrightarrow{P_ф} = \frac{\overrightarrow{\hbar\omega_{41}}}{c}$ і енергію $\hbar\omega_{41}$, система замкнена, тому виконуються закони збереження імпульсу і енергії: до випромінення повний імпульс системи іон + фотон дорівнює нулю, а після випромінювання $\overrightarrow{Mv}$, і $\frac{\overrightarrow{\hbar\omega_{41}}}{c}$ де $M-$ маса іона гелію, отже закон збереження імпульсу має вигляд:

$$0 = \frac{\overrightarrow{\hbar\omega_{41}}}{c} + \overrightarrow{Mv}\ .$$

Закон збереження енергії: $-E_4 = -E_1 + \frac{Mv^2}{2} + |P_ф| \cdot c$, де $P_ф$ - імпульс фотона, модуль якого дорівнює Mv, а $\frac{Mv^2}{2}$ -кінетична енергія віддачі іона, тоді закон збереження енергії запишеться так:

$$-E_4 = -E_1 + \frac{Mv^2}{2} + Mvc.$$

Як видно з рівнянь законів збереження імпульсу і енергії, відповідь до задачі простіше отримати з першого рівняння

$$v = \frac{\hbar\omega_{41}}{MC} = \frac{E_4 - E_1}{Mc} = \frac{\frac{-Z^2R_\infty}{16} + \frac{Z^2R_\infty}{1}}{Mc} = \frac{4R_\infty - \frac{4R_\infty}{16}}{Mc} = \frac{\frac{15}{4}R_\infty}{Mc} =$$

$$= \frac{15*21{,}797*10^{-19}}{4*2*(1{,}673+1{,}675)*10^{-27}*2{,}998*10^{8}} = 4{,}07 \text{ м/с}.$$

Відповідь: випромінювання іоном гелію фотона супроводжується рухом іона з швидкістю 4,07 м/с у напрямку, протилежному напрямку випромінювання.

Задача № 3. Нерухомий іон літію Li^{++} у збудженому стані випромінює фотон, що відповідає третій лінії серії Бальмера, який влучає у нерухомий атом водню в основному стані. Чи відбудеться іонізація атому водню? Відповідь обґрунтувати.

Пояснення до розв'язання задачі. Для розв'язання задачі треба знайти енергію фотона, який випромінює іон літію, і порівняти її з енергією іонізації атома водню в основному стані. Третя лінія серії Бальмера виникає при переході електрона з 5 – го енергетичного рівня на другий, $к = 5$, $n = 2$.

$E_ф = ħ\omega_{52} = \frac{Z^2R_\infty}{4} - \frac{Z^2R_\infty}{25} = Z^2R_\infty\frac{21}{100} = 9 * 13{,}606 * \frac{21}{100} =$ 25,715 еВ.

Відповідь: отримане значення енергії фотона більше за енергію іонізації атома водню в основному стані 13,606 еВ, звідси можна стверджувати, що іонізація атома водню відбудеться.

Задача № 4. Нерухомий іон гелію He^+ випромінює фотон, що відповідає першій лінії серії Лаймана, який влучає у нерухомий атом водню. Знайти швидкість вибитого з атома водню електрона.

Пояснення до розв'язання задачі. Фотон іона гелію влучає в атом водню, тому постає питання, чи достатня енергія цього фотона, щоб іонізувати атом водню? Якщо енергія фотона достатня для іонізації атома водню, то відбудеться явище фотоефекту, за законом якого можна буде знайти швидкість вибитого електрона. Тому спочатку необхідно знайти енергію випроміненого фотона.

1. $ħ\omega = Z^2R_\infty\left(\frac{1}{1} - \frac{1}{4}\right) = 4 * 21{,}79710^{-19} * \frac{3}{4} = 65{,}39 * 10^{-19}$ Дж $= 40{,}8$ еВ.

Цієї енергії достатньо для іонізації атома водню (40,8 еВ $>$ 13,6 еВ), отже має місце явище фотоефекту.

2. $ħ\omega = A + \frac{mv^2}{2} = 21{,}8 * 10^{-19} + \frac{mv^2}{2}$,

звідси знайдемо швидкість електрона, вибитого з атома водню, тут A – робота виходу електрона з атома водню (енергія іонізації атома).

$$v = \sqrt{\frac{2*(65{,}4*10^{-19}-21{,}8*10^{-19})}{9{,}109*10^{-31}}} = 3{,}1*10^{6} \text{ м/с}.$$

Відповідь: швидкість вибитого електрона дорівнює $3{,}1 \cdot 10^6$ м/с.

Задачі для самостійного розв'язання

№ 1. Обчислити радіуси орбіт електрона для n = 1 в атомі водню, іонах гелію He^+, літію Li^{++} , порівняйте їх і зробіть висновок.

№ 2. Покажіть, за якої умови частота обертання електрона ω_0 буде співпадати з частотою переходу з енергетичного рівня n +1 на рівень n.

(*Вказівка-у формулі частоти випромінювання електрона необхідно* n *спрямувати до* ∞).

№ 3. Нерухомий іон гелію He^+ випромінює фотон, що відповідає першій (головній) лінії серії Пашена, який попадає в нерухомий атом водню основному стані. Чи відбудеться іонізація атома водню? Відповідь обґрунтувати.

№ 4. Допускаючи, що теорія Бора – Резерфорда атома водню справедлива для багатоелектронних атомів, знайти номер атома Z при якому швидкість електрона для n = 1 буде дорівнювати швидкості світла. Зробити висновок.

№ 5. Нерухомий атом водню випромінює фотон, що відповідає першій лінії серії Лаймана. Знайти швидкість віддачі атома водню і порівняти її з енергією фотона.

№ 6. Користуючись формулою (2), показати, що енергія іонізації атома водню в основному стані дорівнює $\frac{me^4}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon_0^2}$.

№ 7. Найдіть межі серій Лаймана, Бальмера для атому водню й іону гелію. Зробіть висновок.

№ 8. Із рівності імпульсу хвилі $\frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ й імпульсу електрона в атомі водню mv, де v його швидкість, знайдіть довжину хвилі λ і порівняйте її з довжиною орбіти електрона, зробіть висновок.

№ 9. Допускаючи, що теорія Бора – Резерфорда атома водню справедлива для багатоелектронних атомів, визначте у скільки разів електрон в атомі урану знаходиться ближче до ядра, ніж в атомі водню?

№10. Знайти швидкість електрона в атомі водню й іоні гелію He^+ для $n = 1$, порівняти їх і зробити висновок.

№11. На яку найменшу відстань може наблизитися протон з кінетичною енергією 0,2MeV до нерухомого ядра ${}^{6}_{3}Li$?

№ 12. Яку енергію збудження треба надати іону літію, щоб він міг випромінити фотон головної лінії (першої) серії Бальмера?

№ 13. Якому елементу належить воднеподібний спектр, довжини хвиль якого у 9 разів коротше, ніж у водню?

№ 14. Знайти енергію зв’язку електрона в основному стані, потенціал іонізації, перший потенціал збудження і довжину головної лінії серії Лаймана для іона гелію.

№ 15. З якою найменшою швидкістю повинен рухатися атом водню в основному стані, щоб при непружному лобовому зіткненні з іншим нерухомим атомом водню в основному стані один з них міг випромінити фотон?

№ 16. Знайти частоту обертання ω електрона на n – ій орбіті водне подібного іона.

(*Вказівка – Використайте закон збереження моменту імпульсу та вираз* $v = \omega r$ *для обертального руху*)

Розділ 2

Основні положення корпускулярно–хвильового дуалізму

Сукупність частинок, хвиль або частинок і хвиль разом утворюють фізичну систему, основною характеристикою якої − є енергія E, яка складається з енергій окремих хвиль, частинок та енергій їхніх взаємодій. Енергія фізичної системи флуктуює і характеризується середньо квадратичною флуктуацією $< E^2>$. Причиною флуктуації енергії частинок є хаотичність їхнього руху, а причиною флуктуації енергії хвиль − хаотичність їхніх фаз. Різні розділи фізики описують фізичну систему різними параметрами (молекулярна фізика – масою частинки m, енергією E, імпульсом $\vec{p}$, температурою T і т. д., термодинаміка – макропараметрами: об’ємом, тиском, температурою, термодинамічними потенціалами і т. д.) і дають різні формули для $<\delta E^2>$.

В електродинаміці (фізична система –тільки хвилі) середньо квадратичні флуктуації енергії фізичної системи в інтервалі частот $d\omega$ визначаються такою формулою:

$$<\delta E^2>_{\text{хв.}} = \frac{\pi^2 c^3 <E>^2}{\omega^2 V d\omega}, \qquad (6)$$

де V − об’єм фізичної системи.

У термодинаміці (частинки і хвилі):

$$<\delta E^2>_{\text{фіз. сис.}} = kT^2\,\frac{d<E>}{dT}. \qquad (7)$$

У молекулярній фізиці (тільки частинки):

$$<\delta E^2>_{\text{част.}} = \hbar\omega<E>. \qquad (8)$$

З формул (6) і (8) виходить, що з ростом частоти ω флуктуації енергії частинок збільшуються (формула 8), а флуктуації енергії хвиль зменшуються (формула 6), і навпаки. Тобто, з ростом частоти хвилі ведуть себе як частинки. Для знаходження середнього значення енергії фізичної системи Ейнштейн використав формулу Планка для спектральної густини енергії ρ_ω, яку випромінює абсолютно чорне тіло за 1 секунду з одинці об’єму в інтервалі частот $d\omega$:

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)}, \qquad \text{тоді } <E> = \rho_\omega V d\omega = \frac{\hbar\omega^3 V d\omega}{\pi^2 c^3\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)}.$$

З формули (7) знайдемо середньо квадратичну флуктуацію енергії фізичної системи (частинки і хвилі):

$$<\delta E^2>_{\text{фіз. сис.}} = kT^2 \frac{d<E>}{dT} = \frac{\hbar^2\omega^4 V d\omega}{\pi^2 c^3}\left\langle \frac{1}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)} + \frac{1}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)^2}\right\rangle =$$

$$= \frac{\hbar\omega^3 V d\omega}{\pi^2 c^3\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)} * \omega + \frac{\pi^2 c^3}{\omega^2 V d\omega} * \frac{\hbar^2\omega^6 V^2 (d\omega)^2}{\pi^4 c^6\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)^2} = < E > \hbar\omega + \frac{\pi^2 c^3}{\omega^2 V d\omega} < E >^2 =$$

$$= <\delta E^2>_{\text{част}} + <\delta E^2>_{\text{хв}}. \qquad (9)$$

Таким чином з вище наведеного розрахунку виходить, що флуктуації фізичної системи складаються із суми флуктуацій частинок і хвиль. Можна уявити собі об'єм, з якого відкачали гази, охолодили (частинок немає), від генератора хвиль запустили хвилі в об'єм і виміряли флуктуації енергії, і як виходить з формули (9), вони складаються з флуктуацій хвиль і частинок, яких там немає (відкачані). Для пояснення такого парадоксу де Бройль запропонував гіпотезу, згідно якої частинка може мати хвильові властивості, тобто, поводити себе як хвиля, і навпаки, хвиля може мати властивості частинки. Він запропонував функцію, яка описує хвильові властивості частинки $\psi(r,t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$, її називають функцією де Бройля. Це плоска монохроматична хвиля. Групова швидкість такої хвилі $v_г = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = v$ дорівнює швидкості частинки, а фазова – швидкості світла $v_ф = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega\hbar}{k\hbar} = \frac{E}{p} = \frac{pc}{p} = c$. Згідно з гіпотезою де Бройля можна прирівняти імпульси і енергії частинки і хвилі:

$$mv = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}, \ \hbar\omega = \frac{mv^2}{2}.$$

У функції де Бройля можна знайти ще одну цікаву особливість. У вираз довжини хвилі $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}$ підставимо швидкість електрона в атомі водню (3) $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{8\pi^2\hbar^2\varepsilon_0 n}{mZe^2}$ і порівняємо з довжиною орбіти L по якій обертається

електрон L = $2\pi r$ = $\frac{8\pi^2\hbar^2\varepsilon_0 n^2}{mZe^2}$, відношення $\frac{L}{\lambda} = n,$ тобто довжина орбіти, по якій рухається електрон, дорівнює цілому числу довжин хвиль де Бройля. Звідси можна зробити висновок про те, що електрон в атомі проявляє хвильові властивості. Гіпотеза де Бройля була експериментально підтверджена. У досліді інтерференції хвиль замість оптичних хвиль брали електрони, які прискорювалися електричним полем з потенціалом U. На фотоплівці отримували таку ж картину світлих і темних ділянок, як із оптичними променями.

Знайдемо умови, за яких має місце інтерференція електронів. Для цього у формулі інтерференції $d{\cdot}sin\varphi=k\lambda/2$ замінемо характеристику хвилі λ на характеристику частинки масу m. З формули $p^2/2m = e{\cdot}U$ знайдемо імпульс електрона і прирівняємо його імпульсу хвилі: $p = \sqrt{2meU}$, звідси $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}$. Цей вираз для λ підставимо в формулу інтерференції і отримаємо: $d{\cdot}sin\varphi=\frac{k\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}$, де κ – ціле число. В отриманій формулі відсутня довжина хвилі, явище інтерференції спостерігається для електронів тільки з такою енергією eU, для якої виконується умова $\frac{k\pi\hbar}{d\sqrt{2meU}} \leq 1$. На питання де знаходиться та частинка, властивості якої описуються хвилею де Бройля, дав відповідь Гейзенберг. Для цього треба взяти не одну хвилю, а сукупність хвиль, хвильові вектори $\vec{k}$ яких лежать в малому інтервалі $\Delta\vec{k}$, і скласти їх. Для спрощеного варіанту, коли хвилі розповсюджуються уздовж осі X, розрахунок показує, що їх амплітуди компенсуються за винятком деякого інтервалу Δx, де сумарна амплітуда цих хвиль різко збільшується, знайдене $\Delta x \approx \frac{2\pi}{\Delta k_x}$.

Звідси отримаємо $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar$, це співвідношення отримало назву принцип невизначеностей Гейзенберга і є одним з основних засад квантової фізики. Згідно цього принципу не можна **одночасно** виміряти імпульс і координату частинки з хвильовими властивостями (мікрочастинки), такі частинки принципово не можуть знаходитися у стані спокою.

Приклади розв'язання задач.

Задача № 1. Знайти швидкість нейтрона, при якій його імпульс дорівнює імпульсу фотона з довжиною хвилі 10^{-9} м.

Пояснення до розв'язання задачі. Оскільки мова в задачі йде про імпульс частинки і фотона, треба взяти до уваги формули імпульсів: $p = mv,\ p_ф = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$.

Прирівнюючи значення імпульсів, знайдемо швидкість нейтрона:

$$v = \frac{2\pi\hbar}{m\lambda} = \frac{2 * 3{,}142 * 1{,}054 * 10^{-34}}{1{,}675 * 10^{-27} * 10^{-9}} = \ 395{,}42\frac{\text{м}}{\text{с}}.$$

Відповідь: швидкість нейтрона дорівнює 395,42 $\frac{\text{м}}{\text{с}}$.

Задача № 2. Яким може бути найменший лінійний розмір електрона?

Пояснення до розв'язання задачі. Оцінити розмір електрона (тобто, величину Δx), можна за умови, що він має найбільший імпульс, згідно принципу невизначеностей Гейзенберга $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim 2\pi\hbar$. Найбільший імпульс електрона буде при його швидкості, близькій до швидкості світла. Тоді

$$\Delta x \approx \ \frac{2\pi\hbar}{mc} = \ \frac{2*3{,}142*1{,}054*10^{-34}}{9{,}109**\square 2{,}998*10^{8}} = 2{,}4\square 10^{-12}\ \text{м}.$$

Задача № 3. Знайти довжину хвилі фотона, якщо його імпульс дорівнює імпульсу електрона з енергією 10,2 еВ.

Пояснення до розв'язання задачі. Треба перейти до системи СІ і виразити електрон-вольти у джоулях: 10,2 еВ =10,2·1,602·10^{-19}=16,34·10^{-19}Дж. Далі знайти імпульс електрона $p = \sqrt{2mE},$ а потім довжину хвилі.

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{2 \cdot 3{,}142 \cdot 1{,}054 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 16{,}34 \cdot 10^{-19}}} = 0{,}38 \text{ нм.}$$

Задачі для самостійного розв'язання.

№ 1. Знайти швидкість електрона, при якій його імпульс дорівнює імпульсу фотона з довжиною хвилі λ = 52·10^{-9} м.

№ 2. Яку енергію необхідно надати електрону, щоб його дебройлівська довжина хвилі зменшилася з 15·10^{-10} м до 5·10^{-10} м ?

№ 3. Оцінити прискорюючий потенціал U, при якому буде спостерігатися інтерференція електронів на щілині шириною 40 нм при $к$ = 25.

№ 4. Оцінити невизначеність швидкості електрону в атомі водню, вважаючи його розмір рівним d=Δx=0,1 нм. Порівняти отриману величину зі швидкістю електрона в атомі водню при n = 1.

№ 5. Яку енергію необхідно надати електрону, щоб його дебройлівська довжина хвилі дорівнювала 8·10^{-11} м?

№ 6. Знайти енергію, при якій довжина дебройлівської хвилі буде дорівнювати комптонівській довжині хвилі ($\lambda_к = \frac{2\pi\hbar}{mc}$).

№ 7. Оцінити найменші похибки, з якими можна визначити швидкість електрона, нейтрона, кульки масою 10^{-4} г, якщо координати частинок і центра мас кульки відомі з невизначенністю (похибкою) 1мкм.

№ 8. Під час радіоактивного розпаду деяких ядер з них вилітають α – частинки (ядра атому гелію), γ фотони (γ випромінювання) і електрони. Чи можна на основі цих фактів стверджувати, що електрон входить до складу ядра?

№ 9. Показати, що на орбіті електрона з радіусом орбіти при n = 3 вміщується три дебройлівські хвилі.

Розділ 3

Рівняння Шредінгера, рух мікрочастинок в потенціальних полях

Оскільки гіпотеза де Бройля була експериментально підтверджена, то виникла необхідність у рівнянні, яке описувало б стан частинок, що мають хвильові властивості. Таке рівняння вивів Шредінгер, яке й отримало його ім'я. Для вільної хвильової частинки рівняння Шредінгера можна вивести, використовуючи функцію де Бройля

$$\psi(r.t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \tag{10}$$

та рівність енергій частинки і хвилі

$$\frac{\mathrm{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_\mathrm{x}^2 + k_\mathrm{y}^2 + k_z^2\right) = \hbar\omega. \tag{11}$$

З формули (10) знайдемо $k_\mathrm{x}, k_y, k_z, \omega$, підставимо в (11) і отримаємо

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right)\psi(\vec{r}, t) = \frac{d\psi(\vec{r}t)}{dt}\,. \tag{12}$$

Для стаціонарного стану хвильова функція не залежить від часу, тоді в (10) частоту ω замінимо на $\frac{E_k}{\hbar}$, використаємо оператор Лапласа Δ і отримаємо рівняння у такому вигляді:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) = E_k\psi(\vec{r}). \tag{13}$$

Замінивши кінетичну енергію E_k на повну енергію частинки $E = E_k + U(r)$, отримаємо рівняння Шредінгера для частинки, що рухається у потенціальному полі $U\,(\vec{r})$:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}))\psi(\vec{r}) \ = E\psi(\vec{r}). \qquad (14)$$

В цьому рівнянні $\psi(\vec{r})$ описує стаціонарний стан хвильової частинки у потенціальному полі $U(\vec{r})$ і вигляд $\psi(\vec{r})$ буде залежати від $U(\vec{r})$. Сама по собі функція $\psi(\vec{r})$ ніякого фізичного сенсу не має, сенс має тільки $|\psi(\vec{r},t)|^2$, $|\psi(\vec{r},t)|^2$ являється густиною ймовірності знайти частинку у момент часу t у точці з координатою $\vec{r}$. Тоді, якщо частинка існує у просторі, то ймовірність знайти її у просторі буде дорівнювати одиниці.

$$\int_0^V |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1. \qquad (15)$$

Цю формулу використовують для визначення амплітуди нормованої хвильової функції. З фізичного сенсу квадрату модуля хвильової функції виходить, що вона повинна бути ***кінцевою, неперервною і диференційованою***. Рівняння Шредінгера використали для знаходження хвильової функції електрона в атомі водню, (для двох тіл – електрона і ядра задача розв’язується точно) хвильова функція електрона, яка була отримана, є добутком трьох функцій – полінома Лаггера $R_n^\ell(r)$, полінома Лежандра $Y_\ell^m(\theta)$ і експоненціальної функції $\Phi(\varphi)=\Phi_0 e^{im\varphi}$:

$$\psi_{n\ell m}(r) = \ \psi_0 R_n^\ell(r) Y_\ell^m(\theta)\cdot \Phi(\varphi),$$

де ψ_0 знаходиться за формулою (15).

Хвильова функція електрона атома водню залежить не тільки від r,φ,θ, але й від чисел $n,\ \ell,\ m$. Число n визначає енергію електрона в атомі (формула 2), число ℓ - величину орбітального моменту імпульсу електрона $M_\ell = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$, а число m – величину проекції орбітального моменту на вибрану вісь (z) $M_z = \hbar m$. Число n приймає значення 1, 2, 3,…∞, число ℓ від 0,1, 2, 3,…до $n - 1$, а число m приймає значення 0, ±1, ±2,….±ℓ, всього 2ℓ+1 значень.

Орбітальний момент електрона M_ℓ виникає в результаті його руху як частинки з масою m навколо ядра, а оскільки електрон заряджена частинка, то виникає і магнітний момент μ електрона. Вектори механічного моменту $\overrightarrow{M_\ell}$ і магнітного $\vec{\mu}$ направлені протилежно $\vec{\mu}= \gamma\cdot\vec{M}_\ell$, де $\gamma=\frac{e}{2m} < 0$ називають гіромагнітним відношенням, e – заряд електрона, m – маса електрона. Таким чином магнітний момент електрона дорівнює

$$\mu = \gamma\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} = \beta\sqrt{\ell(\ell+1)}\,, \qquad (17)$$

де $\mu_Б = \gamma\hbar$ – магнетон Бора, найменший магнітний момент електрона. Орбітальний момент електрона в атомі і його магнітний момент, як видно з (17), мають дискретні значення.

З результатів розв’язання рівняння Шредінгера виходить, що електрон в атомі не має траєкторії, займає деякий об’єм біля ядра, межі цього об’єму (лінії) називають орбіталями, форма орбіталі і її положення у просторі визначаються поліномом Лежандра, який залежить від квантових чисел ℓ і m:

$$Y_\ell^m(\theta) = \frac{1}{2^\ell \ell!}(1-cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}} \frac{\partial^{\ell+m}(cos^2\theta-1)^\ell}{\partial cos\theta^{\ell+m}}. \qquad (18)$$

Знання хвильової функції частинки дозволяє знайти середні значення $<a>$ усіх характеристик частинки (енергію, імпульс, координату) за формулою

$$< a > = \frac{\int_0^V \psi(\vec{r})\hat{a}\psi^*(\vec{r})dV}{\int_0^V \psi(\vec{r})\psi^*(\vec{r})dV}\,, \qquad (19)$$

де $\hat{a}$ – оператор відповідної величини: оператор імпульсу $\hat{a} = \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$, оператор енергії $\hat{a} = \hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(\vec{r})$, оператор координати $\hat{a} = \hat{\vec{r}} = \vec{r}$, а $\psi^*(\vec{r})$ комплексно спряжена хвильова функція. За допомогою рівняння Шредінгера можна розв’язувати такі задачі, які класичною фізикою принципово не можна розв’язати, наприклад, рух частинки з енергією $E_к$ через потенціальний бар’єр U_0 шириною d при $E_к < U_0$. В цьому випадку рівняння Шредінгера дає можливість розрахувати ймовірність $P(d,U_0,E_k)$ знайти хвильову частинку за бар’єром:

$$P(d, U_0, E_k) = \frac{16}{\left(\frac{k_1}{k}+\frac{k}{k_1}\right)^2} e^{-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E_k)}} \approx \mathrm{e}^{-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E_k)}}, \qquad (20)$$

де $k = \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar}$, $k_1 = \frac{\sqrt{2m(U_0-E_k)}}{\hbar}$. Якщо частинка з масою m і кінетичною енергією $E_к$ знаходиться в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з потенціальною енергією U_0 (глибина ями) $U_0 > E_k$, то вона може вийти за межі ями на відстань $\boldsymbol{x}$ з ймовірністю:

$$P(x) = \psi_0^2 e^{-\frac{2x\sqrt{2m(U_0-E_k)}}{\hbar}}, \qquad (21)$$

де ψ_0 знаходиться за формулою (15).

Експериментальна перевірка одного з теоретичних результатів розв’язання рівняння Шредінгера – квантування орбітального моменту електрона (дослід Штерна-Герлаха) – показала, що електрон має не тільки квантований орбітальний момент, а й особистий квантований момент, який було названо спіновим. Спіновий момент електрона характеризується квантовим числом s, яке дорівнює $\frac{1}{2}$ і визначається за формулою $M_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}$, а його проекція M_{sz} на вибрану вісь приймає два значення $M_{sz} = \hbar m_s$, де $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Теоретичне обгрунтування наявності у електрона спінового моменту було дано англійським фізиком Діраком, який вивів рівняння Шредінгера для релятивістського випадку. Тепер для знаходження енергії електрона в атомі водню необхідно враховувати не тільки енергію кулонівської взаємодії електрона і ядра, а й енергію взаємодії двох магнітних моментів –

орбітального і спінового, енергію спін-орбітальної взаємодії $E_{\ell s}$. Кожен енергетичний рівень електрона (формула 2) розщеплюється на два підрівні, бо маємо $m_{sz} = \pm\frac{1}{2}$. Відношення енергії спін-орбітальної взаємодії $E_{\ell s}$ (для s = ½ і ℓ = 1) до енергії іонізації атома водню R_∞ дорівнює $\frac{E_{\ell s}}{R_\infty} = \alpha = \frac{1}{137}$, ця величина називається сталою тонкої структури енергетичного спектру електрона. Тепер повний момент електрона буде визначатися квантовим числом $j = \ell \pm s$. Енергія електрона в атомі водню з урахуванням спін-орбітальної взаємодії визначається формулою:

$$E_{nj} = -\frac{Z^2 R_\infty}{n^2} - Z^4 R_\infty \alpha^2 \left(\frac{\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}}{n^2} \right). \qquad (22)$$

З урахуванням спіна електрона його хвильова функція буде залежати від чотирьох квантових чисел – n, ℓ, m_ℓ m_s, тобто стан електрона визначається цими чотирма числами. Усі електрони з однаковим квантовим числом n утворюють оболонку, їх позначають буквами K (для n = 1), L (для n = 2), M (для n = 3) і т. д., а з однаковим квантовим числом ℓ - підоболонку. Якщо ℓ дорівнює 0, підоболонку називають s – підоболонкою, якщо ℓ = 1, називають p – підоболонкою, ℓ = 2, - d – підоболонкою, ℓ = 3, f – підоболонкою і т.д.

Експериментально було визначено, що кутові моменти атомів складаються за різними механізмами. Для легких атомів (перша половина таблиці хімічних елементів) моменти складаються за схемою Рассел-Саундерса: окремо складаються спінові моменти електронів s_i, утворюючи повний спіновий момент атома M_S, окремо складаються орбітальні моменти електронів атома, утворюючи повний орбітальний момент атома M_L, який разом з M_S утворює повний момент атома M_J. Другий механізм (j-j механізм) для важких атомів полягає в тому, що складається спіновий і орбітальний моменти одного електрона $\mu_j = \mu_\ell + \mu_s$, і сума усіх повних моментів електронів атома утворюють повний момент атома M_J.

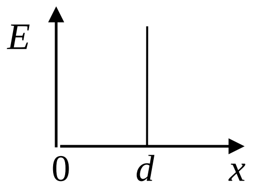
Приклади розв'язання задач

Задача № 1. Чому дорівнюють усі орбітальні моменти електрону та їх проекції у стані електрона з n = 3.

Пояснення до розв'язання задачі. Орбітальний момент електрона залежить від числа ℓ, яке може приймати значення 0,1,2,3….n – 1. Оскільки в задачі n = 3, то ℓ буде дорівнювати 0,1,2. За формулою $M_\ell = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ знаходимо орбітальні моменти: $M_0 = 0$, $M_1 = \hbar\sqrt{2}$, $M_2 = \hbar\sqrt{6}$. Тепер знайдемо проекції цих моментів, які визначаються формулою $M_z = \hbar m$, де m приймає значення 0, ±1, ±2. Тоді для M_0 проекція $M_{z0} = 0$, для M_1 проекції будуть рівні 0, ± $\hbar$, для M_2 проекції будуть дорівнювати 0, ±$\hbar$, ± 2 $\hbar$.

Відповідь: орбітальні моменти електрона дорівнюють 0, $\hbar\sqrt{2}$, $\hbar\sqrt{6}$, проекції цих моментів дорівнюють відповідно: 0; 0, ± $\hbar$; 0, ± $\hbar$, ± 2$\hbar$.

Задача № 2. В одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками і шириною a знаходиться електрон. Знайти нормовані хвильові функції електрона, зробити їх аналіз і знайти ймовірність перебування електрона у точці $X = d/2$.



Пояснення до розв'язання задачі. Зробимо рисунок до задачі. Використаємо умови, яким повинна задовольняти хвильова функція – неперервність функції та її похідної, і врахуємо, що потенціальна енергія $U(r) = 0$. Враховуючи умови задачі, рівняння Шредінгера (14) буде мати такий вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} * \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - E\psi(x) = 0 \text{, або } \psi''(x) + \kappa^2\psi(x) = 0, \quad \kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Розв'язком цього рівняння є гармонічна функція $\psi(x) = \psi_0 \sin(kx + \varphi)$. Для визначення φ використаємо граничні умови: оскільки стінки ями нескінченно високі, то $\psi(a) = \psi(0) = 0$, звідси $\sin(0 + \varphi) = 0$, отже φ = 0, (або

$2n\pi,\ n \epsilon Z)$ і $\sin kd = 0$, отже $kd = n\pi$, звідси $k = \frac{n\pi}{d}$. Таким чином маємо $\psi(x) = \psi_0 \sin\frac{\pi nx}{d}$.

Для визначення амплітуди функції ψ_0 скористаємося формулою (15):

$$\int_0^a \psi_0^2 sin^2\left(\frac{\pi nx}{d}\right) dx = \psi_0^2 \int_0^a \left(\frac{1-\cos\frac{2\pi nx}{d}}{2}\right) dx = \psi_0^2 * \frac{d}{2} = 1.$$

Звідси $\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{d}}$.

Отже $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{d}}\sin\left(\frac{\pi nx}{d}\right)$. Тепер можна знайти ймовірність *p(x)* знаходження електрона у точці $x = d/2$: $P(d/2) = \left|\psi\left(\frac{d}{2}\right)\right|^2 = \left|\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi nd}{2d}\right)\right|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi n}{2}\right)$. Як видно з отриманої формули ймовірність залежить від числа n, при $n = 1$ ймовірність буде максимальна $P(d/2) = 2/d$.

Відповідь: нормована хвильова функція електрона в одновимірній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками має вигляд: $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{d}}\sin\frac{\pi nx}{d}$, ймовірність знайти електрон в середині ями дорівнює $2/a$.

Задача № 3. Хвильова функція електрона в основному стані атома водню має такий вигляд $\psi(r) = \psi_0 e^{-\frac{r}{r_Б}}$, знайти середнє значення модуля кулонівської сили, що діє на електрон.

Пояснення до розв'язання задачі. За умовою задачі необхідно використати формулу (19).

Скориставшись сферичною симетрією задачі, отримаємо:

$$|F| = \frac{\int_0^\infty \psi_0 e^{-\frac{r}{r_Б}}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\right)\psi_0 e^{-\frac{r}{r_Б}} * 4\pi r^2 dr}{\int_0^\infty \psi_0^2 e^{-\frac{2r}{r_Б}} * 4\pi r^2 dr} = \frac{e^2 * \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{r_Б}} dr}{4\pi\varepsilon_0 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{r_Б}} r^2 dr} = \frac{\frac{e^2 r_Б}{2}}{\pi\varepsilon_0 \frac{r_Б^3}{4}} = \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 r_Б^2}.$$

Відповідь: середнє значення модуля кулонівської сили $\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 r_Б^2}$.

Задачі для самостійного розв'язання.

№ 1. Частинка масою m рухається в одновимірній потенціальній ямі шириною a з нескінченно високими стінками. Знайти енергію частинки.

№ 2. Частинка масою $m = 3{\cdot}10^{-27}$ кг знаходиться в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками. Знайти ширину потенціальної ями, якщо різниця енергій між рівнями $n_1 = 1$ і $n_2 = 3$ дорівнює 0,5 еВ.

№ 3. Яким чином можна пояснити той факт, що електрон в атомі водню у стані з $n = 1$ не має орбітального моменту.

№ 4. Електрон в атомі водню знаходиться у стані, який описується хвильовою функцією $\psi(r) = \psi_0 * e^{-\frac{r}{r_0}}$, де ψ_0 і r_0 сталі величини. Знайти значення ψ_0, енергії електрона і r_0.

№ 5. Знайти усі проекції орбітального моменту електрона у стані з $n = 4$.

№ 6. Знайти відношення ширини потенціальної прямокутної ями з нескінченно високими стінками, у якій знаходиться частинка, до її дебройлівської довжини хвилі.

№ 7. Побудуйте графік залежності ймовірності *P(x)* знайти частинку в потенціальній прямокутній ямі з нескінченно високими стінками для $n_1 = 1$, $n_2 = 2$, $n_3 = 3$.

№ 8. Побудуйте графіки функцій $|Y_1^1(\theta)|^2$, $|Y_2^1(\theta)|^2$ (орбіталі), використовуючи Mathcad, або іншу програму; які орбітальні моменти і їх проекції мають електрони, стан яких описується цими функціями?

№ 9. Будемо вважати, що електрони в платині утворюють електронний газ, тобто, вони є вільними частинками і рухаються з кінетичною енергією 5 еВ (енергія Фермі), для платини енергія виходу електрона дорівнює 6,4 еВ. Знайти ймовірність вилітання електрона з платинової пластини на відстань 1мкм.

№ 10. Знайти середнє значення електростатичного потенціалу, який створює електрон в центрі атома водню (на ядрі), якщо електрон знаходиться в основному стані, який описується функцією $\psi(r) = \psi_0 e^{-\frac{r}{r_Б}}$.

№ 11. Хвильова функція електрона в основному стані атома водню має такий вигляд $\psi(r) = \psi_0 e^{-\frac{r}{r_Б}}$, знайти середнє значення потенціальної енергії електрона в полі ядра.

№ 12. Знайти ймовірність проходження електрона з енергією 5еВ через потенціальний бар'єр шириною 350 нм і висотою 7еВ.

№ 13. Частинка з масою m знаходиться в основному стані в одновимірній потенціальній ямі шириною a з нескінченно високими стінками. Знайти ймовірність перебування частинки в області $\frac{d}{4} < x < \frac{d}{2}$.

№ 14. Хвильова функція частинки масою m в основному стані в одновимірному потенціальному полі $U(\mathrm{x}) = \frac{kx^2}{2}$ має вигляд $\psi(\mathrm{x}) = A * \mathrm{e}^{-\alpha \mathrm{x}^2}$. Використовуючи рівняння Шредінгера, знайти енергію частинки та сталу α.

Розділ 4

Багатоелектронні атоми, енергетичні і спектральні терми

Модель Бора-Резерфорда атома водню описує властивості тільки атома водню. При розгляді багатоелектронних атомів виникають такі питання: як розподіляються електрони по станах, як складаються орбітальні моменти електронів та інші.

Спін частинки визначає спосіб розподілу частинок по станах. Якщо спін частинки s не ціле число (1/2, 3/2 і т.д.), такі частинки розподіляються по станам таким чином, що в одному стані не може знаходиться дві і більше частинок. Такі частинки назвали ферміонами (на честь італійського фізика Е.Фермі), це електрони, протони та інші частинки. А якщо s дорівнює цілому числу (1, 2 і т.д.), то в одному стані може знаходиться будь-яке число частинок (їх назвали бозонами на честь фізика Ш.Бозе), це фотони, куперовські пари. Порядок розподілу ферміонів по станах сформулював В.Паулі, він був названий принципом Паулі. Оскільки у електрона s = ½, а $m_s = \pm\frac{1}{2}$, то за принципом ***Паулі в одному стані <u>в атомі</u> не може бути більше двох електронів.*** Визначимо максимальну кількість електронів на p – підоболонці. В цьому випадку ℓ = 1, $m_\ell = 0, +1, -1$, кількість станів дорівнює 2ℓ +1, а в кожному стані може знаходиться два електрона з $m_s = \pm\frac{1}{2}$, отже всього буде 2(2ℓ+1) = 6 електронів. Атом, як система заряджених частинок, за принципом Ле Шательє буде прямувати до стану з найменшою енергією, це означає, що електрони будуть займати спочатку *K*- оболонку, потім *L*- оболонку і т. д.

Таким чином розподіл електронів атома по станах визначається принципом Паулі і мінімальною енергією, і називається електронною конфігурацією атома. Електронна конфігурація атомів кисню (8 електронів) і кремнію (14електронів) має такий вигляд: $1s^2 2s^2 2p^4$ і $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$. Такий «правильний» прядок заповнення підоболонок і оболонок має місце до 19 елементу ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ – аргон), далі повинно було б бути $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$, але в дійсності заповнюється не $3d^1$, а стан $4s^1$, потім $4s^2$ і лише після цього заповнюється підоболонка 3d: елемент скандій $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$, елемент тітан $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$ і т.д. На підоболонці d може бути тільки 10 електронів, це 10 металів, їх називають $3d$ - металами.

Експериментально було визначено (*правила Хунда*), що найменшу енергію має атом в тому випадку, коли його спіновий момент має максимальне значення (квантове число S максимальне, $S_{max} = \sum_1^N m_{si}$.) і тільки при максимальному S повинен бути і максимальний орбітальний момент (максимальне квантове число |*L*|, $L_{max} = \sum m_{\ell i,}$ де сума береться по усіх *тільки зайнятих* електронами станах). Стан атома з найменшою енергією називається основним. Знайдемо квантові числа атомів кисню і кремнію в основному стані. Зазначимо, що спіновий і орбітальний моменти *заповнених* підоболонок дорівнюють нулю, тобто S = 0 і L = 0, тому враховуються електрони тільки незаповнених підоболонок. Для кремнію це буде 2p^2. Враховуючи вище сказане, 2 електрона на підоболонці p треба так розташувати, щоб їхній спіновий момент був максимальний, і при цьому і орбітальний момент теж був максимальним. Для p підоболонки ℓ = 1, m_ℓ приймає значення 0, –1 і +1, отже по цих станах (0,–1,+1) треба розмістити два електрона так, щоб сума їх квантових чисел m_s була максимальною, це можливо тільки у випадку паралельності спінових моментів, як векторних величин, $m_{s1} = +\frac{1}{2}$, $m_{s2} = +\frac{1}{2}$, $S = 1$. Ці електрони можна розмістити по різних станах різними способами з урахуванням принципу Паулі. Якщо їх розмістити у станах $m_{\ell 2} = 1$ і $m_{\ell 3} = -1$, то L = 0, а якщо – у станах $m_{\ell 1} = 0$ і $m_{\ell 2} = 1$, або у станах $m_{\ell 1} = 0$ і $m_{\ell 3} = -1$, то $|L|$ = 1.Таким чином, в основному стані атом кремнію має спін S = 1 і L = 1. Квантове число повного кутового моменту J визначається таким чином: якщо підоболонка заповнена електронами більше чим наполовину, то $J = L + S$, якщо менше чим наполовину, тоді $|J| = L – S$. Тобто, квантове число J для заданих L і S може приймати значення від $L + S$ до $|L – S|$. Для атому кремнію J = 0. Сукупність чотирьох квантових чисел атома *n, J, L, S визначають спектральний терм атома*, він записується таким чином: L може приймати значення 0,1,2,3,.. і т.д., кожному значенню L ставлять у відповідність букву 0 → S, 1 → P, 2 → D, 3 → F і т.д. Спектральний терм записується так: n^{2S+1}(Літера)$_J$, величина 2S+1 називається мультиплетністю спектрального терма, для кремнію він має вигляд $3^3\mathrm{P}_0$, спектральний терм кисню $2^3\mathrm{P}_2$. Знання квантових чисел J, L, S дає можливість визначати спіновий кутовий момент атома $M_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}$, орбітальний кутовий момент атома $M_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}$ і повний кутовий момент атома $M_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$, а також їх магнітні моменти. Магнітні моменти атома направлені антипаралельно механічним і пропорційні їм. Коефіцієнти пропорційності для орбітального і спінового моментів різні, для орбітального моменту коефіцієнт пропорційності дорівнює електронному гіромагнітному відношенню γ. Для спінового моменту це відношення у 2 рази менше, тому вектори повного механічного $\vec{M}_J$ і повного магнітного $\vec{\mu}_J$ моментів не є колінеарними. Ступінь не колінеарності їх визначається коефіцієнтом g, який називають *фактором Ланде*, він дорівнює

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}. \qquad (23)$$

Отже, магнітні моменти атома визначаються формулами:
Орбітальний магнітний момент атома $|\vec{\mu}_L| = \gamma\hbar\sqrt{L(L+1)} = \mu_Б\sqrt{L(L+1)}$.
Спіновий магнітний момент атома $|\vec{\mu}_S| = 2\gamma\hbar\sqrt{S(S+1)} = 2\mu_Б\sqrt{S(S+1)}$.
Повний магнітний момент атома $|\vec{\mu}_J| = g\mu_Б\sqrt{J(J+1)}$.

Знання спектральних термів необхідні для пояснення спектрів випромінювання і поглинання. При цих процесах повинні виконуватися закони збереження енергії і моменту імпульсу (кутового моменту), це можливо тільки тоді, коли квантові числа атома змінюються таким чином: Δn може приймати довільні значення, $\Delta L = \pm1$, $\Delta J = 0, \pm1$, $\Delta S = 0$. Ці зміни квантових чисел називають *правилами відбору*. Для прикладу розглянемо основний $1s^2$ і збуджені спектральні терми атому гелію $1s^1 2s^0 2p^1$, $1s^1 2s^0 2p^0 3s^1$, $1s^1 2s^0 2p^0 3s^0 3p^1$. Для основного стану $1s^2$ квантові числа n = 1, L = 0, S = 0, J = 0 спектральний терм 1^1S_0, для $1s^1 2s^1$ квантові числа n = 2, L = 0, а S буде для паралельних спінів S = 1, для антипаралельних S = 0 і буде два значення J = 1, 0, отже буде два спектральні терми 2^3S_1 і 2^1S_0. Для збудженого стану $1s^1 2s^0 2p^1$ квантові числа такі: n = 2, для квантового числа S значення будуть S = 0, S = 1, для L = 1, тоді J = 0, 1, 2. Для цього стану спектральні терми наступні: 2^1P_1, 2^3P_1, 2^3P_2, 2^3P_0. Для стану $1s^1 2s^0 2p^0 3s^1$ спектральні терми такі: 3^1S_0, 3^3S_1, для стану $1s^1 2s^0 2p^0 3s^0 3p^1$ спектральні терми 3^1P_1, 3^3P_1, 3^3P_2, 3^3P_0. З урахуванням правил відбору переходи одного з електронів атому гелію будуть відбуватися між такими спектральними термами: $2^1P_1 \leftrightarrow 2^1S_0$, $3^1S_0 \leftrightarrow 2^1P_1$ (це синглети), і між термами 3^3P_1, 3^3P_2, 3^3P_0 та термом 2^3S_1, і термом 3^3S_1 та термами 2^3P_1, 2^3P_2, 2^3P_0 (це триплети). Отже, спектр гелію виглядає як сукупність поодиноких ліній випромінювання (синглети) і трійок ліній (триплети). Окремої уваги заслуговують атоми лужних металів Li, Na, Ka, Rb, Cs, Fr, в яких на зовнішній підоболонці знаходиться один електрон. Такі атоми можна розглядати, як систему двох заряджених частин: одна частина – це електрон на s-підоболонці, а друга – це ядро атома і усі інші електрони внутрішніх заповнених підоболонок, але цю другу частину не можна вважати точковим зарядом із-за електронних підоболонок з радіусом $r \sim n^2$. В такому випадку при знаходженні енергії s-електрона силу Кулона представляють у вигляді ряду, в такому випадку енергія s-електрона буде дорівнювати:

$$E_n = -\frac{Z^2 R_\infty}{(n-\Delta)^2}, \qquad (24)$$

де Δ називають поправкою Рідберга, або квантовою поправкою.

Приклади розв'язання задач.

Задача № 1. Для атомів з електронною конфігурацією $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ і $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$ написати їх основні спектральні терми, знайти усі їхні кутові моменти і кут між орбітальним і спіновим моментами цих атомів.

Пояснення до розв'язання задачі. Для визначення основних спектральних термів необхідно знайти квантові числа атомів із вказаними конфігураціями. Оскільки повністю заповнені підоболонки не дають внеску в квантові чиста атома, то в даному випадку квантові числа будуть визначатися електронами p^5 і d^7.

1). Усі p – електрони мають квантове число $\ell = 1$ і $m_\ell = 0, \pm 1$ і на цій підоболонці може максимально знаходиться згідно принципу Паулі 6 електронів. Треба розташувати 5 електронів на 6 позиціях так, щоб їх спін був максимальний і при цьому було і L максимальне. Цього можна досягти при такому розташуванні електронів по станах: m_ℓ = 1 0 - 1.

Тут позначено: $m_s = +\frac{1}{2}$ це ↑, $m_s = -\frac{1}{2}$ це ↓ , m_s → ↑↓ ↑↓ ↑.

Тоді

$$S = \sum m_s = +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, \quad L = \sum m_\ell = 1 + 1 + 0 + 0 + (-1) = 1.$$

Число електронів 5 > 3, тоді $J = L + S = \frac{3}{2}$. Отже, основний спектральний терм атома буде $3^2P_{3/2}$. Його кутові моменти будуть $M_L = ħ\sqrt{L(L+1)} = ħ\sqrt{2}$,

$$M_s = ħ\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)} = ħ\frac{\sqrt{3}}{2}, \quad M_j = ħ\sqrt{J(J+1)} = ħ\frac{\sqrt{15}}{2}.$$

Кут між спіновим і орбітальним моментами можна знайти за відомою формулою:

$$a^2 = b^2 + c^2 - 2bc\cos\alpha, \text{ тоді } M_j^2 = M_L^2 + M_S^2 - 2M_L M_S \cos\alpha.$$

Звідси $\cos\alpha = \frac{M_L^2 + M_S^2 - M_j^2}{2M_L M_S} = -\frac{1}{\sqrt{6}}$, $\alpha = \arccos\left(-\frac{1}{\sqrt{6}}\right)$.

2). Усі d-електрони мають квантове число $\ell = 2$, для якого $m_\ell = 2, 1, 0, -1, -2$, у цих станах може знаходиться не більше 10 електронів. Розташуємо 7 електронів у цих станах з урахуванням принципа Паулі і правил Хунда і знайдемо S та L:

$m_\ell =$ 2 1 0 -1 -2 , $m_s \to$ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑.

Тоді

$$S = \sum m_s = +1/2 - 1/2 + 1/2 - 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2,$$

$$L = \sum m_\ell = 2 + 2 + 1 + 1 + 0 - 1 - 2 = 3.$$

Оскільки підоболонка d заповнена більше ніж наполовину, то $J = L + S = 9/2$. Таким чином спектральний терм атома $3^4F_{9/2}$.

Кутові моменти:

$$M_S = ħ\sqrt{\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)} = ħ\frac{\sqrt{15}}{2}, \quad M_L = ħ\sqrt{12}, M_j = ħ\frac{\sqrt{99}}{2}.$$

$\cos\alpha = \frac{M_L^2+M_S^2-M_J^2}{2M_LM_S}$ = - $\frac{3}{2\sqrt{5}}$, α = arccos(- $\frac{3}{2\sqrt{5}}$).

Відповідь: спектральні терми атомів $3^2P_{3/2}$, $3^4F_{9/2}$, кути між спіновими та орбітальними моментами атомів дорівнюють α = arccos (- $\frac{1}{\sqrt{6}}$), α = arccos(- $\frac{3}{2\sqrt{5}}$).

Задача № 2. Визначити усі можливі значення квантового числа J для L =3 і S=2.

Пояснення до розв'язання задачі. В задачі мова не йде про кількість електронів на підоболонці, то необхідно враховувати всі можливі випадки (менше і більше половини кількості електронів на підоболонці). Тоді J буде змінюватися від $L + S$ до $|L – S|$ через одиницю 5, 4, 3, 2, 1.

Відповідь: квантове число J може приймати такі значення 5, 4, 3, 2, 1.

Задача № 3. Визначить спектральні терми між якими можливі переходи електронів: $^2S_{1/2}$, $^3P_2$, $^2D_{3/2}$, $^2P_{3/2}$, $^3S_1$, $^2F_{3/2,}$ $^2P_{1/2}$, $^3F_2$.

Пояснення до розв'язання задачі. Треба скористатися правилами відбору $\Delta L = \pm 1$, $\Delta J = 0, \pm 1$, $\Delta S = 0$. Оскільки $\Delta S = 0$, це означає, що переходи можливі тільки між термами з однаковою мультиплетністю, з урахуванням інших правил маємо переходи між такими термами: $^2S_{1/2} \leftrightarrow {}^2P_{3/2}$; $^2S_{1/2} \leftrightarrow {}^2P_{1/2}$; $^3P_2$, $\leftrightarrow$ $^3S_1$; $^2D_{3/2} \leftrightarrow {}^2P_{3/2}$; $^2D_{3/2} \leftrightarrow {}^2F_{3/2}$; $^2D_{3/2} \leftrightarrow {}^2P_{1/2}$.

Задача № 4.. Знайти повний механічний момент атома у стані з S = 3/2 і L = 2, а його повний магнітний момент μ_J = 0.

Пояснення до розв'язання задачі. Щоб знайти повний механічний момент атома, необхідно знати квантове число J. Для даних S і L число J може приймати декілька значень. Для знаходження J скористаємося умовою μ_J = 0, це можливо тоді, коли фактор Ланде g буде дорівнювати 0. Отже, з рівняння g = 0 знайдемо квантове число J.

$$0 = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)} = \frac{3}{2} + \frac{\frac{3}{2}*\frac{5}{2}-6}{2J(J+1)},$$

звідси J = 1/2. $M_J = \hbar\frac{\sqrt{3}}{2}$.

Відповідь: повний механічний момент атома $M_J = \hbar\frac{\sqrt{3}}{2}$.

Задачі для самостійного розв'язання

№ 1. Написати основний спектральний терм атома з електронною конфігурацією $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$, знайти його кутові моменти та кут між повним і орбітальним моментами.

№ 2. Написати основний терм для атома $1s^2 2s^2 2p^2$ і усі можливі терми для його збуджених станів $1s^2 2s^2 2p^1 3s^1$ і $1s^2 2s^2 2p^1 3s^0 3p^1$ та їх кутові моменти.

№ 3. Написати усі можливі спектральні терми атома водню у стані з квантовим числом $n = 3$ і їх фактори Ланде.

№ 4. Визначити усі можливі значення квантового числа J для $L = 2$ і $S = 2$.

№ 5. Знайти кількість електронів на єдиній незаповненій підоболонці атома, спектральний терм якого $^6S_{5/2}$, $^2P_{3/2}$.

№ 6. Знайти основні спектральні терми атомів, незаповнені підоболонки яких мають 3 p-електрона, 4 p-електрона.

№ 7. Знайти квантову поправку для $3P$ терма атома натрію, перший потенціал збудження якого дорівнює 2 В, а енергія зв'язку $3s$ – електрона в основному стані дорівнює 5 еВ.

№ 8. Енергія зв'язку $2s$ – електрона атома літію в станах $2^2S_{1/2}$ і $2^2P_{1/2}$ дорівнює 5,4 еВ і 3.5 еВ відповідно. Знайти квантові поправки для цих термів.

№ 9. На єдиній незаповненій підоболонці атома знаходиться 4 електрони, а в основному стані атома $L = 2$. Написати основний спектральний терм атома.

№ 10. Атом знаходиться у стані, мультиплетність якого дорівнює 3, а повний механічний момент дорівнює $\hbar\sqrt{20}.$ Знайти можливі значення квантового числа L.

№ 11. Знайти можливі мультиплетності атомів: D_2, $P_{3/2}$, F_1.

Розділ 5

Атом в магнітному полі (ефект Зеємана)

Коли атом знаходиться в магнітному полі, то необхідно враховувати не тільки взаємодію електрона з ядром і взаємодію орбітального і спінового магнітних моментів (спін-орбітальна взаємодія), а і взаємодію цих магнітних моментів з магнітним полем В (Зеєманівська взаємодія). В такому випадку оператор енергії електрона буде мати такий вигляд:

$$\widehat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \widehat{U}(\vec{r}) + \hat{E}_{SL} + \hat{E}_{SB} + \hat{E}_{LB}, \tag{25}$$

де $\hat{E}_{s\ell}$ – оператор енергії спін-орбітальної взаємодії, $\hat{E}_{SB}$- оператор енергії взаємодії спінового магнітного моменту атома з магнітним полем, $\hat{E}_{LB}$ – оператор енергії взаємодії орбітального магнітного моменту атома з магнітним полем. Рівняння Шредінгера з таким оператором енергії точно не розв'язується, тому використовують наближений метод – метод послідовних наближень. Якщо енергія $E_{sL} \gg \left(\hat{E}_{SB} + \hat{E}_{LB}\right)$, тоді до енергетичних рівнів тонкої структури додаються Зеєманівські енергетичні рівні, які отримують після розв'язання рівняння з оператором енергії $\widehat{\mathcal{H}}_1 = \hat{E}_{SB} + \hat{E}_{LB}$. Якщо $E_{sL} \ll \left(\hat{E}_{SB} + \hat{E}_{LB}\right)$, тоді знаходять енергетичні рівні з оператором $\widehat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \widehat{U}(\vec{r}) + \hat{E}_{SB} + \hat{E}_{LB}$ і до них додають енергетичні рівні тонкої структури. У випадку $E_{sL} \ll \left(\hat{E}_{SB} + \hat{E}_{LB}\right)$ магнітне поле називають сильним, а якщо $E_{sL} \gg \left(\hat{E}_{SB} + \hat{E}_{LB}\right)$ поле називають слабким, ці нерівності називають критеріями сильного і слабкого поля. Фізично це можна пояснити таким чином:

сильне поле розриває зв'язок між орбітальним і спіновим моментами і тоді $\vec{\mu}_L$ і $\vec{\mu}_S$ рухаються у полі незалежно, слабке поле не в змозі розірвати зв'язок між моментами і в полі рухається повний магнітний момент атома $\vec{\mu}_J$.

Енергія магнітного моменту в магнітному полі визначається скалярним добутком $E_з = -\vec{\mu} * \vec{B}$, і екстремальні значення її будуть дорівнювати $E_з = \mu_z * B_z$. Тоді для сильного магнітного поля

$$E_з = \pm(\mu_{Lz} + \mu_{Sz}) * B_z = \pm\gamma\hbar(m_L + 2m_S) * B_z = \pm\mu_Б(m_L + 2m_S) * B_z. \tag{26}$$

Для слабкого магнітного поля

$$E_з = \pm\mu_{Jz} * B_z = \pm g\gamma\hbar m_J * B_z = \pm g\mu_Б m_J * B_z. \quad (27)$$

При переходах електрона між підрівнями виконуються правила відбору: $\Delta m_J = 0, \pm 1$, $\Delta m_S = 0$, $m_L = \pm 1$, 0. Для випадку $m_L = \pm 1$ коливання відбуваються поперек магнітного поля, а для $\Delta m_L = 0$ – вздовж поля.

Приклади розв'язання задач

Задача № 1. На скільки підрівнів розщепиться терм $^5D_4$ в слабкому і сильному магнітних полях, розрахувати в магнетонах Бора Зеєманівську енергію цього терму в слабкому полі з індукцією B.

Пояснення до розв'язання задачі. За формулами (26) і (27) кількість підрівнів визначається в слабкому полі кількістю проекцій m_J магнітного моменту на вісь Z (від -J до +J), а сильному полі – кількістю чисел, яке приймає дужка $(m_L + 2m_S)$. У випадку слабкого поля J = 4, тоді m_J приймає 2J+1 значення 4, 3, 2, 1, $0, -1, -2, -3, -4$, отже, терм розщепиться на 9 підрівнів. Із терма виходить, що квантові числа L = 2 і S = 2, тоді $m_L = 2$, 1, 0, –1, –2 і m_S = 2, 1, 0 ,–1, –2, сума $(m_L + 2m_S)$ приймає 13 різних значень, $^5D_4$ терм розщепиться на 13 підрівнів. Розрахуємо енергії підрівнів терма у магнітному полі. Для цього знайдемо фактор Ланде для терма:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = \frac{3}{2} + \frac{2*3 - 2*3}{2*4*5} = \frac{3}{2}.$$

Тоді за формулою (27) отримаємо значення енергії усіх підрівнів: $E_1 = \frac{3}{2} * 4 * \mu_Б * В = 6\mu_Б В$, $E_2 = \frac{3}{2} * 3 * \mu_Б * В = \frac{9}{2}\mu_Б В$, $E_3 = 3\mu_Б В$, $E_4 = \frac{3}{2}\mu_Б В$, $E_5 = 0$, $E_6 = -\frac{3}{2}\mu_Б В$, $E_7 = -3\mu_Б В$, $E_8 = -\frac{9}{2}\mu_Б В$, $E_9 - 6\mu_Б В$.

Відповідь: розраховано кількість підрівнів, на які розщеплюється терм $^5D_4$ в сильному і слабкому полі і енергії підрівнів у слабкому полі.

Задача № 2. Розрахувати повне розщеплення $\Delta\omega$ спектральної лінії $^3D_3 \leftrightarrow$ $^3P_2$ у слабкому магнітному полі з індукцією 0,34 Тл.

Пояснення до розв'язання задачі. Повне розщеплення – це найбільша різниця між енергетичними підрівнями термів в магнітному полі. Для визначення енергетичних підрівнів необхідно розрахувати фактори Ланде термів:

$g_D = \frac{4}{3}$, $g_P = \frac{3}{2}$. Частота випромінювання $\omega = \Delta E/\hbar = (g_D \beta m_{JD} B - g_P \beta m_{JP} B)/\hbar$. Звідси

$$\omega_{max} = \left(-\frac{4}{3} + 3\right)\frac{9{,}274078^{-24} \cdot 0{,}34}{1{,}054 * 10^{-34}} = 5{,}266 \cdot 5^{10} c^{-1}.$$

$$\omega_{min} = \left(\frac{4}{3} - 3\right)\frac{9{,}274078^{-24} \cdot 0{,}34}{1{,}054 * 10^{-34}} = -5{,}266 \cdot 5^{10} c^{-1}.$$

Тоді $\Delta\omega = \omega_{max} - \omega_{min} = 10{,}532 \cdot 10^{-10}\ с^{-1}$.

Згідно правил відбору $\Delta m_J = \pm 1$, можливі переходи електрона між підрівнями двох термів $^3D_3 \leftrightarrow$ $^3P_2$ показані на схемі.

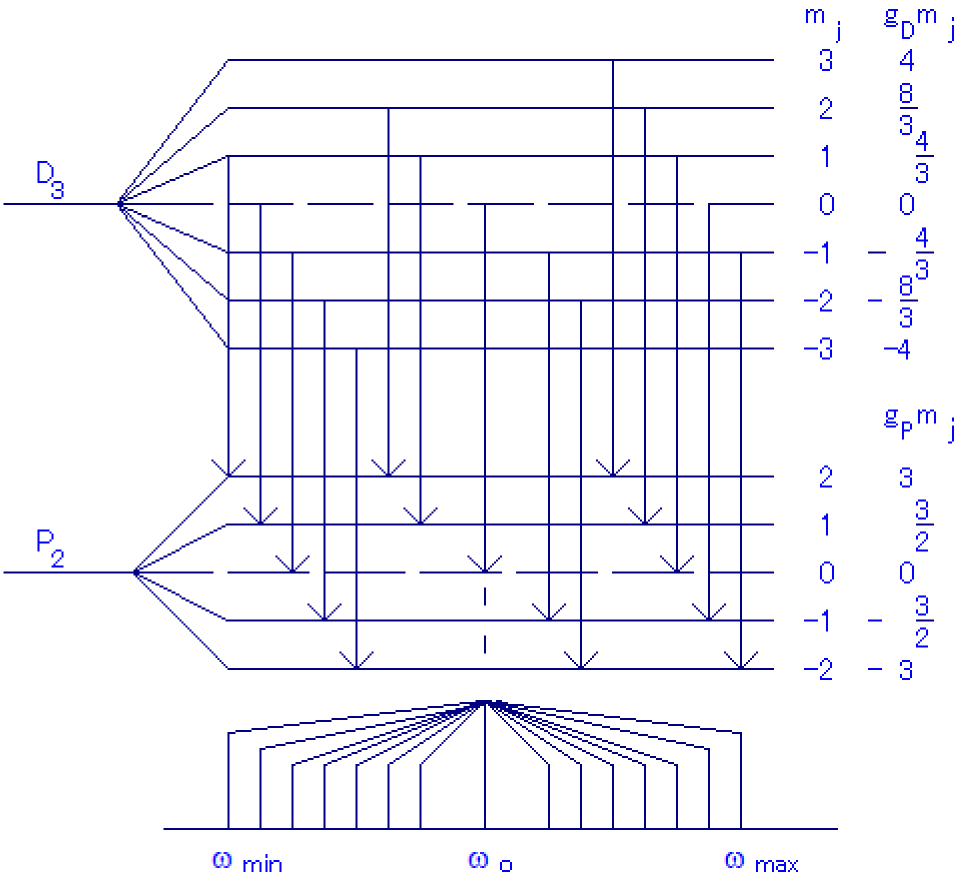


Схема переходів електрона між підрівнями двох термів в слабкому полі.

Тут ω_0 - частота випромінювання при переході електрона атома зі стану, якому відповідає терм $^3D_3$, у стан з термом $^3P_2$ без магнітного поля. В слабкому магнітному полі лінія випромінювання з частотою ω_0 розщеплюється на 10 компонент, які симетрично відносно ω_0 лежать в інтервалі від ω_{min} до ω_{max}.

Відповідь: частота повного розщеплення $\Delta\omega$ в слабкому магнітному полі лінії переходу між термами $^3D_3$ і $^3P_2$ дорівнює 10,532 $с^{-1}$.

Примітка: із за симетрії спектра повне розщеплення $\Delta\omega$ дорівнює подвоєній частоті ω_{max} або ω_{min}.

Задача №3. Для яких спектральних термів кількість підрівнів, на які розщеплюється терми у сильних і слабких магнітних полях, буде однакова?

Пояснення до розв'язання задачі. Кількість підрівнів, на які розщеплюється спектральний терм у сильному і слабкому полях, визначається кількістю значень, які приймають Δm_J і $(\Delta m_L + 2\Delta m_S)$. Щоб кількість підрівнів була однаковою, треба, щоб кількість значень $\Delta m_J = 2J + 1$ дорівнювала кількості значень $(\Delta m_L + 2\Delta m_S)$. Згадаємо, що $J = |L \pm S|$, це означає, рівність може реалізуватися тільки при $L = 0$, і тоді $J = S$, $\Delta m_S = 2S + 1$, або $S = 0$, тоді $J = M_L = 2L + 1$. Таким чином, це будуть S – терми ($L = 0$), або синглетні терми, для яких $S = 0$ ($2S+1 = 1$).

Відповідь: терми, у яких $L = 0$, або $S = 0$.

Задачі для самостійного розв'язання

№ 1. Нарисувати схему можливих переходів в слабкому магнітному полі 0,1 Тл між термами $^2P_{3/2}$ і $^2S_{1/2}$ і знайти максимальне розщеплення.

№ 2. Знайти відношення інтервалів розщеплення термів $^2P_{3/2}$ і $^2P_{1/2}$ в слабкому і сильному магнітних полях.

№ 3. Спектральна лінія переходу між деяким термом і термом $S_{1/2}$ в слабкому магнітному полі розщеплюється на шість компонент. Написати символ цього терму.

№ 4. На скільки компонентів відбудеться розщеплення спектральних термів $^3D_3$, $^3P_0$, $^2F_{5/2}$, $^3S_1$ в слабкому і сильному магнітних полях?

№ 5. Знайти енергію взаємодії повного магнітного моменту атома в стані $^2D_{5/2}$ з магнітним полем 1 Тл.

№ 6. Атом з конфігурацією$1s^2 2s^2 2\mathrm{p}^4$ знаходиться на відстані r = 1 см від довгого прямого провідника, по якому протікає струм 20 А. Знайти силу, яка діє на атом.

№ 7. Атом $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3\mathrm{p}^3$ знаходиться у центрі витка радіусом r = 3 см, по якому тече струм 15 А. Знайти силу, діючу на атом.

№ 8. Знайти відношення розщеплень термів атомів $1s^2 \ldots .3d^7$ і $1s^2 \ldots 3\mathrm{p}^4$ в слабкому магнітному полі.

Розділ 6

Рентгенівське випромінювання

Рентгенівські промені, вперше відкриті українцем Іваном Пулюєм у 1877році, досліджені і запатентовані німецьким фізиком В.К. Рентгеном у 1895 році, представляють електромагнітні хвилі короткої довжини (порівняні з розміром атома). Вони можуть мати неперервний (суцільний) або дискретний спектр. Виникають промені при бомбардуванні електронами металевої пластини (яку називають анодом або антикатодом). Властивості променів залежать від енергії електронів eU та матеріалу анода. Якщо енергія електронів eU менша за енергію, необхідну для того, щоб вибити електрон з внутрішньої оболонки атома аноду, то випромінювання буде суцільним. Це випромінювання виникає при гальмуванні електронів електричним полем зовнішніх електронів атомів аноду. Оскільки ці атоми знаходяться у стані хаотичного руху, то і прискорення гальмування буде хаотично змінюватися, а значить, і частота випромінювання буде змінюватися хаотично. Частина енергії eU йде на випромінювання, а частина – на нагрівання аноду. Максимальна частота суцільного рентгенівського випромінювання визначається формулою:

$$eU = \hbar\omega_{max}. \qquad (28)$$

Необхідно зауважити, що за цією формулою можна виміряти сталу Планка.

При подальшому збільшенні різниці потенціалів U енергія електронів збільшується, вони проникають в середину атома і вибивають електрони з внутрішніх оболонок атома. На звільнені місця переходять електрони із зовнішніх оболонок і за постулатом Бора випромінюють електромагнітні хвилі, які і є рентгенівським характеристичним випромінюванням. Його називають характеристичним, оскільки воно залежить від характеристики матеріалу анода. Характеристичне випромінювання утворює серії, які називають K, L, M, N. K – серія обумовлена переходами електронів із L оболонки на K – оболонку. Оскільки L – оболонка розщеплюється за рахунок спін-орбітальної взаємодії на три підрівні, то K – серія має три лінії K_α, K_β, K_γ. L – серія обумовлена переважно переходами електронів з M – оболонки на L – оболонку. Довжина хвилі випромінювання була експериментально визначена Мозлі ще до моделі атома Бора-Резерфорда:

$$\lambda(Z-\sigma)^2 = C, \qquad (29)$$

де σ і C – сталі величини для певної серії характеристичного випромінювання. Формула Мозлі виводиться з формули (5) за умови, що при вибиванні електронів з атома змінюється заряд на величину $(Z-\sigma)e$.

Дуже мала довжина хвилі рентгенівського випромінювання (0,01÷ 10 нм) є причиною того, що механізм поглинання і розсіювання речовиною оптичних і рентгенівських променів різний. Для рентгенівських променів поглинання і розсіювання має атомну природу, тобто ці процеси у речовині відбуваються тільки тоді, коли рентгенівський промінь потрапляє в атом, при цьому мають місце різні процеси – збудження атомів, вибивання електронів з різних оболонок атома, збільшення кінетичної енергії атома, що приводить до нагрівання аноду. Для K_α– серії атомів формула (29) має такий вигляд:

$$\omega_{k_\alpha} = \frac{3}{4}R_\infty(Z-\sigma)^2, \qquad (30)$$

де $\sigma = 1$ для легких атомів.

Приклади розв'язання задач

Задача № 1. Знайти довжину хвилі K_α– лінії міді (Z = 29), якщо відповідна довжина K_α – лінії заліза (Z = 26) дорівнює $1{,}93\cdot10^{-10}$ м.

Пояснення до розв'язання задачі. Для розв'язання задачі скористаємося формулою Мозлі для K_α – ліній. Тоді з відношення довжин ліній Cu і Fe знайдемо довжину хвилі для міді:

$$\frac{\lambda_{Cu}}{193*10^{-12}} = \frac{(26-1)^2}{(29-1)^2},$$

звідси маємо $\lambda_{Cu} = 1{,}539 * 10^{-10}$ м.

Відповідь: довжина хвилі рентгенівського випромінювання для мідного анода дорівнює $1{,}539\cdot10^{-10}$ м.

***Задача* № 2.** Прискорюючий потенціал електронно–променевої трубки кольорового телевізора (старого випуску) дорівнює 20 кіловольт. Знайти довжину хвилі λ_{min} суцільного рентгенівського випромінювання.

Пояснення до розв'язання задачі. Скористаємося формулою (28), виразивши частоту через довжину хвилі: $\omega_{max} = \frac{2\pi c}{\lambda_{min}}$. Звідси знайдемо довжину хвилі

$$\lambda_{min} = \frac{2\pi\hbar c}{eU} = \frac{2*3{,}14*2{,}998*10^{8}*1{,}05*10^{-34}}{1{,}6*10^{-19}*2*10^{4}} = 6{,}1\cdot 10^{-11}\text{м.}$$

Тому в скляний екран трубки додавали домішки свинцю, який поглинає рентгенівські хвилі, і рекомендували сидіти перед телевізором не ближче 2м.

Задачі для самостійного розв'язання

№ 1. Що являється джерелом рентгенівських променів?

№ 2. Чому рентгенівські промені мають різні енергетичні спектри для різних матеріалів аноду трубки?

№ 3. Розрахувати мінімальну довжину рентгенівської хвилі для прискорюючого потенціалу 3000 вольт.

№ 4. Знайти швидкість і кінетичну енергію електронів, які підлітають до аноду (антикатоду) рентгенівської трубки, якщо довжина хвилі суцільного рентгенівського спектру $\lambda_{min} = 17 * 10^{-12}$м.

№ 5. Знайти λ_{min} суцільного рентгенівського спектру ,якщо після збільшення напруги на рентгенівській трубці у 2 рази λ_{min} змінилося на $48\cdot 10^{-12}$м.

№ 6. При збільшенні напруги на рентгенівській трубці від 10кВ до 20кВ різниця довжин хвиль K_{α}– ліній і λ_{min} збільшилася у 3 рази. Який метал використовується в антикатоді?

№ 7. Які серії характеристичного рентгенівського спектру виникають у молібдені при його опроміненні K_{α}– випромінюванням срібла?

Література

1. И.Е. Иродов, Задачи по общей физике. Наука, М.: 1988, 446 с.

2. Т.П. Лумпієва, Н.М. Русакова, О.Ф. Волков. Практикум з фізики. Розв’язування задач. Частина 2. Донецьк: ДонНТУ, 2015, 227 с.

3. В.Г. Пицюга, С.П. Сергієнко. Лекції для студентів з атомної та ядерної фізики, Вінниця: ДонНУ, 2016, 110 с.