ПРИДНЕСТРОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. Т.Г. ШЕВЧЕНКО

Физико-математический факультет

Кафедра общей и теоретической физики

Атомная физика

Методические рекомендации

г. Тирасполь - 2017

УДК 539.18 (072.8)
ББК В38р30
М54
Составители:
Е.И. Брусенская, к. ф. – м.н., доцент кафедры общей и теоретической физики
Р.А. Хамидуллин, к. ф. – м.н., доцент кафедры общей и теоретической физики
К.Д Ляхомская, к. ф. – м.н., доцент кафедры квантовой радиофизики и систем связи

Рецензенты:
П.И. Хаджи, д. ф. – м.н. профессор кафедры квантовой радиофизики и систем связи
С.М. Соковнич, к. ф. – м.н., доцент кафедры общей и теоретической физики

М54 Атомная физика: методические рекомендации /Сост.: Е.И. Брусенская, Р.А. Хамидуллин, К.Д. Ляхомская - Тирасполь, 2017. - 88 с.

Методические рекомендации по разделу «Атомная физика» для подготовки к промежуточному и итоговому тестированию для студентов физико-математического факультета.

Необходимость создания данных методических рекомендаций для физических и инженерных направлений ФМФ связана с небольшим количеством часов, отводимых на его реализацию по программе согласно ФГОС ВО. В основном, вся имеющаяся в библиотечном фонде литература по данному курсу достаточно широко представляет весь спектр вопросов атомной физики и сопровождается весьма подробным описанием. Поэтому основной целью этих рекомендаций является достаточно краткое по объему и, в тоже время полное и лаконичное по содержанию изложение основных моментов атомной физики. После приведенного справочного материала по соответствующим темам даны варианты тестов промежуточного контроля и примеры практических заданий к нему. В конце пособия приведены тесты итогового контроля по соответствующему разделу физики и примеры контрольных работ. Данное пособие должно помочь студентам в подготовке к соответствующим формам контроля и является тем минимумом в рамках раздела «Атомная физика», который необходим для сдачи экзамена по физике

Рекомендовано Научно-методическим советом ПГУ им. Т.Г. Шевченко

© Е.И. Брусенская, Р.А. Хамидуллин, К.Д. Ляхомская
составление, 2017

Оглавление

Введение……...4
Квантовая оптика……...…….....6
Волновые свойства микрочастиц…….15
Классическое описание атома водорода и
водородоподобных атомов и систем…….....24
Квантовомеханическое описание атома…….....34
Векторная и оболочечная модель атома……..46
Атом в электромагнитном поле……58
Молекулы……67
Варианты тестов итогового контроля по разделу:
квантовая физика……78
Примеры контрольных работ по разделу:
квантовая физика……79
Приложение 1……..80
Приложение 2……..81
Приложение 3……..84
Литература……...87

Введение

Атомная физика - это раздел курса общей физики, в котором изучается структура и свойства атомов в стационарных и возбужденных состояниях, их поведение во внешних электромагнитных полях. Атомная физика существенно отличается от предыдущих разделов общей физики, применяемым для описания состояний атомов и атомных явлений математическим аппаратом.

Вопрос о структуре вещества волновал человечество еще с давних времен. Впервые понятие атома как неделимой структурной единицы вещества было введено еще Демокритом. Такое мнение в физике преобладало достаточно долго. О неделимости атома говорится в первом положении молекулярно – кинетической теории, на основании которого и строится молекулярная физика.

Открытие явлений, связанных с ионизацией атомов, в конце XIX века натолкнуло на мысль о том, что атомы имеют определенную структуру. Опыт Резерфорда по рассеянию α-частиц, который был осуществлен в 1911 году, совершил переворот в представлении о структуре атома и показал, что атомы различных веществ имеют определенную структуру. Всякий атом состоит из небольшого ядра, в котором сосредоточена вся масса, и электронов, вращающихся по определенным орбитам вокруг ядра (планетарная модель).

Однако такое представление о строение атома не находило объяснения в рамках, существующего на тот момент, классического подхода в физике. Поэтому в 1913 году Нильс Бор предложил использовать квазиклассический подход для описания водородоподобных атомов, основанный на специальных постулатах. Но теория Бора также имела ряд недостатков и в связи с этим возникла необходимость в разработке новых более обобщенных теорий и подходов в физике того времени.

В связи с этим в начале XX века был разработан принципиально новый, квантово - механический подход, используемый для описания атомов и атомных явлений. Создание квантовой физики связано с именами ряда замечательных ученых: Планка (теория теплового излучения), Эйнштейна (уравнение фотоэффекта), Бора (квазиклассическая теория атома водорода), де Бройля (уравнения, связывающие корпускулярные и волновые свойства электронов), Гейзенберга, Шредингера, Паули, Дирака и других.

Толчком для создания и развития квантовой механики стал корпускулярно – волновой дуализм, характерный не только для света, но и для элементарных частиц. Многочисленные эксперименты на рубеже XIX – XX веков указывали на то, что свет и частицы в различных ситуациях могут проявлять как корпускулярные, так и волновые свойства. О корпускулярных свойствах света свидетельствовали: эффект Комптона, фотоэффект, тепловое излучение, а о волновых свойствах частиц – опыты по дифракции электронов.

С точки зрения квантовой механики каждому состоянию атома соответствует некая собственная волновая функция и собственная энергия. Их можно получить, решая уравнение Шредингера – основное уравнение квантовой механики. В этом уравнении содержится информация о состоянии системы и взаимодействии, которая заключена в ее гамильтониане. Отличие решений в квантовой механике от решений в классической физике состоит в том, что эти решения могут быть дискретными (квантованными, вырожденными). Волновые функции водородоподобных атомов и их энергетический спектр являются наиболее простыми и хорошо изученными. Энергетические состояния

многоатомных молекул описать значительно труднее, так как необходимо учитывать взаимодействие электронов в них и эффекты, связанные с тождественностью частиц.

Принципиально новый подход позволил разработать квантовомеханические модели атомов: оболочечную, векторную и так далее, которые позволили описать как состояния атомов, так и их химические и физические свойства и связанные с ними особенности взаимодействия. Так, например, оболочечная модель довольно точно предсказала химические свойства различных атомов, а также особенности процессов излучения и поглощения, связанных с переходами атомов между энергетическими состояниями. Векторная модель на качественном уровне позволила объяснить мультиплетность атомных спектров, эффекты Зеемана, Пашена – Бака, магнитомеханические эффекты. Кроме того, были разработаны приближенные методы расчетов для многоэлектронных атомов, которые учитывают не только взаимодействие электронов с ядром, но и друг с другом. К ним относятся вариационный (основан на использовании теории возмущений и наиболее удачном подборе пробной волновой функции), статистический (применяется при достаточно большом числе электронов в атоме) методы, а также методы Ритца и самосогласованного поля (периодический потенциал Хартри - Фока).

В методических рекомендациях по подготовке к промежуточным и итоговым формам контроля к данному разделу физики рассмотрены основные ее главы, изучаемые согласно учебному плану и рабочей программе в заданной последовательности: квантовая оптика, волновые свойства микрочастиц, классическое описание атома водорода и водородоподобных атомов и систем, квантовомеханическое описание атома, векторная и оболочечная модель атома, атом в электромагнитном поле, молекулы. Следует отметить, что аналогичные вопросы рассматриваются в квантовой механике (III курс), где большое внимание уделяется количественным расчетам. Поэтому при изложении атомной физики на первом – втором курсах, большее внимание уделяется не расчетным операциям, а качественным выводам и основным экспериментальным фактам. К каждой главе (теме) дается справочный материал и основные соотношения, а также варианты тестов и примеры решения некоторых задач по соответствующей главе. В конце рекомендаций приводятся тесты итогового тестирования и примеры контрольных работ, а также приложения, содержащие необходимую дополнительную информацию к главам.

Квантовая оптика
Справочный материал к тестированию по теме

Квантовая оптика находится на стыке таких базовых разделов курса общей физики как оптика и атомная физика и описывает корпускулярные свойства света. Как известно, свет имеет дуальную природу и поэтому выбор способа его описания зависит от сути рассматриваемых процессов. Если они связанны с распространением света в различных средах (поглощение, дисперсия, рассеяние, отражение, преломление и т.д.), эффектами перераспределения его интенсивности при наложении световых пучков (интерференция, дифракция и т.д.), то свет следует рассматривать как совокупность электромагнитных волн и описывать с точки зрения волновой оптики. Если же протекающему процессу соответствует дискретный характер взаимодействия света с веществом, то свет рассматривают как поток дискретных порций энергии (впоследствии был выявлен носитель этой энергии - фотон, который является фундаментальным бозоном, отвечающим за электромагнитное взаимодействие) и описывают с помощью аппарата квантовой оптики. К явлениям квантовой оптики относятся: тепловое излучение, фотоэффект, эффект Комптона, давление света и т.д. Именно явления квантовой оптики, наряду с явлениями, вскрывающими волновую природу микрочастиц, стали основой создания квантовой физической теории.

Явление **теплового излучения** является довольно распространенным в различных областях науки и техники. Оно широко применяется в методах биологических и медицинских исследований, в тепловидении, в астрофотометрии, в технических устройствах (лампах накаливания, оптических пирометрах и т.д.) Это связано с тем, что **причиной теплового излучения** является наличие у физического объекта внутренней (тепловой) энергии, которая является функцией температуры. Следовательно, тепловое излучение характерно для всех тел, у которых температура выше нуля кельвин (то есть для всех объектов, существующих во Вселенной). Все остальные виды излучения, природа которых не связана с наличием внутренней (тепловой) энергии у тел, называются **люминесценциями**. **Вид люминесценции** зависит от причины ее возникновения: **хемилюминесценция** - вызвана химическим превращением; **фотолюминесценция** – поглощенным электромагнитным излучением; **катодолюминесценция** – бомбардировкой быстрыми электронами твердых тел и т.д.

Основными характеристиками, излучающего тепловое излучение тела, является его **испускательная** $r_{\omega T}$ и **поглощательная** $\alpha_{\omega T}$ **способности**. Первая характеристика связана с фотометрическим понятием - **энергетическая светимость тела** R. Она есть поток энергии, испускаемый телом по всем направлениям с единицы его поверхности. **Испускательная способность** $r_{\omega T}$ также является потоком энергии с единицы поверхности тела, но при строго фиксированной частоте излучения ω и температуры тела T. **Поглощательная способность** $\alpha_{\omega T}$ равна отношению поглощенного телом потока энергии к падающему потоку. Поглощательная способность является величиной безразмерной, заключенной в пределе $0 \le \alpha_{\omega T} \le 1$ и зависящей от температуры и частоты излучения. Тело, поглощательная способность которого $\alpha_{\omega T} = 1$ для всех частот, называют **абсолютно черным**. В остальных случаях излучающее тело

называют **серым**. С понятием испускательная способность связана **спектральная плотность теплового излучения** $u(\omega,T)$, которая описывается **формулой Планка**. **Формула Планка** была получена на основе предположения о дискретном характере излучения и хорошо согласуется с экспериментальными данными и в области низких частот переходит в формулу Рэлея – Джинса, а для высоких частот – в формулу Вина.

Основными законами теплового излучения являются: закон Кирхгофа, закон Стефана – Больцмана и закон смещения Вина. **Закон Кирхгофа** состоит в том, что отношение испускательной способности к поглощательной, при фиксированных температуре и частоте, не зависит от природы тела и, для всех тел, является величиной постоянной. **Закон Стефана - Больцмана** показывает, что энергетическая светимость тела пропорциональна четвертой степени его температуры. В **законе смещения Вина** утверждается, что наиболее вероятная длина волны теплового излучения (длина волны, соответствующая максимуму спектральной плотности энергии излучения) существенно зависит от температуры: у тел с малыми (комнатными) температурами длина волны соответствует ИК – диапазону; у тел с большой температурой (температура у поверхности Солнца) наиболее вероятная длина волны соответствует оптическому диапазону.

Еще одним явлением квантовой оптики является **фотоэффект.** Следует различать следующие виды фотоэффекта: внешний, внутренний, ядерный и селективный, двухфотонный и другие.

Внешним фотоэффектом называют процесс вырывания с поверхности проводника свободных электронов под действием высокочастотного излучения. Причем, как подтверждает эксперимент, вырвать из проводника можно только **отрицательные частицы**. При этом энергия квантов света должна быть равна или больше работы выхода с поверхности металла. Под **работой выхода** понимают ту **минимальную энергию**, которую нужно затратить, чтобы вырвать с поверхности металла свободный электрон. Работа выхода зависит только от природы материала, ее значения можно найти в соответствующих справочниках.

Внутренний фотоэффект наблюдается в полупроводниках и связан с особенностями их строения. Он приводит к изменению **проводящих свойств полупроводников.** При нормальных условиях, чистый полупроводник, как известно, не проводит электрический ток из-за отсутствия свободных зарядов. При высоких температурах возникают условия (разрыв ковалентной связи между атомами), при которых часть зарядов становиться свободной и полупроводник переходит из непроводящего в проводящее состояние. Причиной такого перехода в некоторых случаях может стать не повышение температуры, а облучение полупроводника высокочастотным светом.

Внутренний фотоэффект также может наблюдаться и **у металлов**. В этом случае свет выбивает не свободные, а внутренние электроны, которые сильно связаны с атомами кристаллической решетки. Как следствие, сильно связанный электрон превращается в свободный.

Ядерный фотоэффект связан с вырыванием нуклонов (протонов и нейтронов) из ядра под действием очень коротковолнового излучения (жесткого рентгеновского или γ - лучей).

Селективный фотоэффект по своей сути похож на любой из перечисленных фотоэффектов, однако он сильно зависит от поляризации электромагнитной волны и угла падающего света.

Впервые фотоэффект (внешний) наблюдался у металлов.

Закономерности (законы) фотоэффекта:

1. Для всякого материала существует своя **красная граница** Она характеризуется **минимальной частотой** $\omega_{гр}$, начиная с которой фотоэффект возможен. Этой минимальной частоте соответствует **максимальная (граничная) длина волны** $\lambda_{гр}$.

2. **Кинетическая энергия электронов** (или соответствующая ей **задерживающая разность потенциалов**), возникающая под действием высокочастотного излучения, зависит только от частоты и не зависит от интенсивности падающего света. При этом зависимость является линейной.

Задерживающей разностью потенциалов U_0 называют такое обратное напряжение между анодом и катодом, которое приводит к полному торможению электронов у катода при падении ЭМВ, частота которой больше минимальной (граничной).

3. Число выбитых электронов (фототок - поток свободных электронов, возникающих за счет фотоэффекта и движущихся под действием прямого напряжения, приложенного между анодом и катодом) прямо пропорционально числу падающих фотонов (интенсивности падающего излучения). Фототок существует даже в отсутствии внешнего прямого напряжения между анодом и катодом, и является достаточно слабым.

На основе приведенных выше закономерностей можно сделать вывод, что фотоэффект представляет собой **индивидуальный акт столкновения** высокочастотного **фотона с отдельным электроном**, приводящий к выбиванию последнего из металла. Это означает, что для объяснения и описания фотоэффекта необходимо пользоваться только аппаратом квантовой оптики. С точки зрения волновой оптики невозможно объяснить ни наличие красной границы фотоэффекта, ни отсутствия зависимости кинетической энергии от интенсивности светового потока, ни время фотоэффекта, которое с точки зрения волновой оптики оказывается намного больше, чем реальное регистрируемое время.

В квантовой оптике внешний фотоэффект описывается энергетическим уравнением, которое получило название уравнения Эйнштейна (за него он в частности и получил Нобелевскую премию). Оно связывает **энергию фотона** $\hbar\omega$ с **работой выхода металла** $A_{вых}$ и **максимальной кинетической энергией** выбитых из металла электронов $\frac{m\upsilon_{\max}^2}{2}$. Уравнение Эйнштейна показывает, что вся энергия фотона, переданная электрону, идет на совершение работы выхода и сообщение ему кинетической энергии.

Под **работой выхода** понимают работу, которую нужно совершить над электроном в металле, чтобы преодолеть удерживающие его в нем связи и вывести его на поверхность.

Под **максимальной кинетической энергией** понимают начальную энергию, которую приобретает электрон у поверхности металла.

Важную роль в развитии квантовой оптики сыграл в свое время и **эффект Комптона**. Баркла (1909 г.), проводя эксперименты с рентгеновским излучением, заметил, что при рассеянии мягкого рентгеновского излучения образуется излучение на той же частоте, как и в случае томсоновского рассеяния, а при рассеянии жесткого рентгена, помимо излучения на основной частоте, образуется

излучение и на меньшей частоте [1]. Однако, количественную оценку этого явления ему сделать не удалось из-за отсутствия в то время методов измерения длины волны рентгеновского излучения.

Чуть позднее, когда стал уже известен этот метод (дифракция рентгеновских лучей на кристалле), Комптон провел аналогичные эксперименты и дал полученным результатам не только качественное, но и количественное объяснение. Он показал, что смещение рассеянного жесткого рентгеновского излучения в длинноволновую область зависит от угла рассеяния рентгеновского фотона: чем он больше, тем больше смещение. При расчетах он использовал законы сохранения энергии и импульса в рассматриваемом эффекте.

Появление в рассеянном излучении дины волны отличной от основной (увеличение длины волны) при рассеянии жесткого рентгеновского излучения на веществе называют **эффектом Комптона.** Энергия рентгеновского фотона при таком столкновении уменьшается за счет передачи ее части внешнему электрону атома или свободному электрону вещества, а длина волны увеличивается.

Эффект Комптона, как и фотоэффект, можно охарактеризовать как **индивидуальный акт столкновения** жесткого рентгеновского фотона с внешним (свободным) электроном атома (вещества). Так как длина волны такого фотона имеет порядок размера атома, а частота намного выше частоты собственных колебаний электрона в атоме (веществе), то его рассеяние происходит только на этом электроне. За счет такого рассеяния и образуется смещенная компонента в спектрах рассеяния. Наличие несмещенной компоненты связано с тем, что часть фотонов может взаимодействовать с внутренними (связанными) электронами атома (вещества). В этом случае фотон взаимодействует с атомом как с целым, а в формуле для комптоновского смещения длины волны нужно учитывать не массу электрона, а массу всего атома, что делает смещение незначительным (оно фактически отсутствует).

Индивидуальность акта столкновения в эффекте Комптона впервые была доказана в опытах, проведенных Боте и Гейгером, в которых они использовали схему совпадений.

Основные соотношения:

Испускательная способность: $$r_{\omega T} = \frac{dR_{\omega T}}{d\omega}$$

Энергетическая светимость: $$R_T = \int dR_{\omega T} = \int_0^\infty r_{\omega T} d\omega$$

Переход от частотной испускательной способности к длинноволновой: $$r_\omega d\omega = r_\lambda d\lambda$$

Поглощательная способность: $$\alpha_{\omega T} = \frac{d\Phi'_\omega}{d\Phi_\omega}$$

где $d\Phi'_\omega$ - поток световой энергии, соответствующий частоте ω, поглощенный телом, а $d\Phi_\omega$ - поток световой энергии, соответствующий частоте ω, падающий на тело.

Закон Кирхгофа: $$\left(\frac{r_{\omega T}}{\alpha_{\omega T}}\right)_1 = \left(\frac{r_{\omega T}}{\alpha_{\omega T}}\right)_2 = \left(\frac{r_{\omega T}}{\alpha_{\omega T}}\right)_3 = \ldots = f(\omega, T)$$

Спектральная плотность энергии: $du_\omega = u(\omega,T)d\omega$

Полная плотность энергии: $u(T) = \int_0^\infty u(\omega,T)d\omega$

Связь испускательной способности

со спектральной плотностью энергии: $f(\omega,T) = \frac{c}{4}u(\omega,T)$

Связь энергетической светимости с плотностью энергии: $R = \frac{c}{4}u$

Закон Стефана – Больцмана: $R = \sigma T^4$

Закон смещения Вина: $T\lambda_m = b$

Формула Планка: $u(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT)-1}$

Формула Вина: $u(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\exp(-\hbar\omega/kT)$

Формула Рэлея – Джинса: $u(\omega,T) = \frac{\omega^2 kT}{\pi^2 c^3}$

Уравнение Эйнштейна: $\hbar\omega = A_{вых} + \frac{m\upsilon_{\max}^2}{2}$

Максимальная кинетическая энергия электронов: $E_к = \frac{m\upsilon_{\max}^2}{2}$

Задерживающая разность потенциалов: $eU_0 = \frac{m\upsilon_{\max}^2}{2}$

Красная граница для длины волны: $\lambda_{гр} = \frac{2\pi\hbar c}{A_{вых}}$

Связь граничной частоты с соответствующей длиной волны: $\lambda_{гр} = \frac{2\pi c}{\omega_{гр}}$

Импульс фотона: $p = \frac{\hbar\omega}{c}$

Импульс фотона в векторной форме: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

где $\vec{k}$ - волновой вектор электромагнитной волны, соответствующий фотону, а $k = \frac{\omega}{c}$ - волновое число.

Закон сохранения импульса в эффекте Комптона: $\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + m\vec{\mathrm{v}}$

где $\hbar\vec{k}'$ - импульс рассеянного фотона, а $m\vec{\mathrm{v}}$ - релятивистский импульс внешнего (свободного) электрона.

Закон сохранения энергии в эффекте Комптона: $\hbar\omega + m_e c^2 = \hbar\omega' + m\mathrm{c}^2$

где $m_e c^2$ - энергия покоя электрона, а $mc^2 = m_e c^2 \Big/ \sqrt{1-\left(\frac{\mathrm{v}}{\mathrm{c}}\right)^2}$ - его полная энергия.

Формула комптоновского смещения длины волны (эффекта Комптона): $\Delta\lambda = \frac{2h}{m_e c}\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = 2\lambda_c \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$

где $\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 0{,}024 \cdot 10^{-10}\,м$ - комптоновская длина волны электрона, θ - угол между направлениями падающего и рассеянного фотона.

Варианты тестов промежуточного контроля по теме

ТЕСТ №1

1. Причиной теплового излучения у любого физического объекта является наличие _____.
2. С каким фотометрическим понятием связана испускательная способность?
3. Какое тело называют абсолютно черным?
4. Спектральная плотность излучения определяется выражением вида:_____.
5. Какие виды фотоэффекта вы знаете?
6. Чем характеризуется красная граница фотоэффекта?
7. Что называют работой выхода?
8. Импульс фотона определяется соотношением вида: _____ .
9. Каким образом можно измерить длину волны рентгеновского излучения?
10. Какие опыты подтвердили индивидуальность акта столкновения для эффекта Комптона?

ТЕСТ №2

1. Как называются виды излучения, природа которых не связана с наличием внутренней (тепловой) энергии у тел?
2. В каких пределах меняется поглощательная способность?
3. Полная плотность энергии определяется интегралом вида:_____.
4. Формула Рэлея – Джинса имеет вид:_____.
5. Как называют процесс вырывания с поверхности проводника свободных электронов под действием высокочастотного излучения?
6. Какой из видов фотоэффекта наблюдается в полупроводниках и связан с особенностями их строения?
7. Максимальная кинетическая энергия электронов определяется выражением вида_____.
8. Запишите связь между полной энергией электрона и его энергией покоя.
9. Комптоновская длина волны электрона определяется выражением:_____.
10. Почему комптоновское смещение незначительное по величине?

ТЕСТ№3

1. Какие явления заложили основу квантовой физики?

2. Испускательная способность определяется соотношением вида _____.
3. Какие параметры должны быть фиксированы в законе Кирхгофа?
4. В каком законе утверждается, что наиболее вероятная длина волны теплового излучения существенно зависит от температуры?
5. Какие частицы вырываются из проводника при внешнем фотоэффекте?
6. Какое физическое явление называется ядерным фотоэффектом?
7. Запишите уравнение Эйнштейна для фотоэффекта.
8. Импульс фотона описывается выражением вида _____.
9. Как называют напряжение между анодом и катодом, которое приводит к полному торможению электронов у катода при падении ЭМВ?
10. Закон сохранения импульса в эффекте Комптона:_____.

ТЕСТ №4

1. Какое физическое тело называют серым?
2. Энергетическая светимость определяется выражением вида _____.
3. Какой физической величине пропорциональна энергетическая светимость тела согласно закону Стефана – Больцмана? Напишите его.
4. Формула Планка имеет вид:_____.
5. Как называется минимальная энергия, которую нужно затратить, чтобы вырвать с поверхности металла свободный электрон?
6. Какой из видов фотоэффекта зависит от поляризации электромагнитной волны и угла падающего света?
7. Связь граничной частоты с соответствующей длиной волны имеет вид:_____.
8. Импульс фотона в векторной форме описывается выражением вида _____.
9. Какова связь между задерживающим напряжением и кинетической энергией электрона?
10. Волновое число определяется отношением: _____.

Примеры заданий с решениями по теме

Задание №1. Определить с помощью формулы Планка числовое значение постоянной Стефана – Больцмана.

Решение:

Предложенная задача на тепловое излучение. Для нахождения постоянной Стефана – Больцмана используем закон Стефана - Больцмана для светимости (1) и выразим ее через плотность энергии (2):

$$R = \sigma T^4 \qquad (1)$$

$$R = \frac{c}{4}u \qquad (2)$$

В результате получим:

$$\sigma = \frac{c}{4T^4}u \qquad (3)$$

Плотность энергии можно рассчитать, используя формулу Планка для спектральной плотности энергии (4) в соотношении для полной энергии (5):

$$u(T) = \int_0^\infty u(\omega, T)d\omega \qquad (4)$$

$$u(\omega,T)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT)-1} \qquad (5)$$

Подставим (5) в (4), а (4) в (3) и получим:

$$\sigma=\frac{c}{4T^4}\frac{\hbar}{\pi^2c^3}\int_0^\infty\frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/kT)-1}d\omega \qquad (6)$$

Обозначим: $x=\hbar\omega/kT$ (7). Тогда: $(kT/\hbar)dx=d\omega$ (8)

Сделаем соответствующую замену в (6):

$$\sigma=\frac{k^4T^4}{4T^4\hbar^4}\frac{\hbar}{\pi^2c^2}\int_0^\infty\frac{x^3}{\exp(x)-1}dx=\frac{k^4}{4\hbar^3}\frac{1}{\pi^2c^2}\int_0^\infty\frac{x^3}{\exp(x)-1}dx \qquad (9)$$

Интеграл в (9) является табличным и имеет значение: $\int_0^\infty\frac{x^3}{\exp(x)-1}dx=\frac{\pi^4}{15}$.

Подставим это значение в (9) и получим:

$$\sigma=\frac{k^4}{60\hbar^3}\frac{\pi^2}{c^2} \qquad (10)$$

Подставим значения известных констант в итоговую формулу и найдем постоянную Стефана - Больцмана:

$$\sigma=\frac{1{,}38^4 10^{-92}(Дж/К)^4}{60\cdot 1{,}05^3 10^{-102}(Дж\cdot с)^3}\frac{9{,}86}{9\cdot 10^{16}(м/с)^2}=0{,}57\cdot 10^{-7}\frac{Вт}{м^2К^4} \qquad (11)$$

Ответ: $\sigma=0{,}57\cdot 10^{-7}\frac{Вт}{м^2К^4}$

Задание №2. При некотором максимальном значении задерживающей разности потенциалов фототок с поверхности лития, освещаемого электромагнитным излучением с длиной волны λ_0, прекращается. Изменив длину волны излучения в $n=1{,}5$ раза, установили, что для прекращения фототока необходимо увеличить задерживающую разность потенциалов в $\eta=2$ раза. Вычислить λ_0.

Решение:

Для решения задачи используем уравнение Эйнштейна для фотоэффекта, в котором вместо кинетической энергии учитывается работа задерживающей разности потенциалов. Запишем такое уравнение для двух, указанных в задаче, случаев:

$$eU_з=\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_0}-A_{вых} \qquad (1)$$

$$\eta eU_з=\frac{2\pi\hbar c n}{\lambda_0}-A_{вых} \qquad (2)$$

Умножим соотношение (1) на η, вычтем из него уравнение (2), а затем выразим искомую длину волны, учитывая, что работа выхода с поверхности лития равна $A_{вых}=2{,}39$ эВ:

$$\eta\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_0}-\eta A_{вых}=\frac{2\pi\hbar c n}{\lambda_0}-A_{вых} \qquad (3)$$

$$(\eta - n)\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_0} = (\eta - 1)A_{вых} \qquad (4)$$

$$\lambda_0 = \frac{(\eta - n)}{(\eta - 1)}\frac{2\pi\hbar c}{A_{вых}} \qquad (5)$$

Подставим в соотношение (5) численные значения:

$$\lambda_0 = \frac{3{,}14 \cdot 1{,}05 \cdot 10^{-34}\,\text{Дж} \cdot \text{с}\; 3 \cdot 10^{8}\,\text{м/с}}{2{,}39 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,\text{Дж}} = 2{,}6 \cdot 10^{-7}\,\text{м} = 0{,}26\ \text{мкм} \qquad (6)$$

Ответ: $\lambda_0 = 0{,}26$ мкм

Задание №3. Фотон с длиной волны $\lambda = 3{,}64$ пм рассеялся на покоящемся свободном электроне так, что кинетическая энергия электрона отдачи составила $\eta = 1/4$ от энергии налетевшего фотона. Найти комптоновское смещение длины волны рассеянного фотона и угол θ, под которым рассеялся фотон.

Решение:

В данной задаче рассматривается эффект Комптона. Запишем для него закон сохранения энергии:

$$\frac{2\pi c\hbar}{\lambda_0} = E_к + \frac{2\pi c\hbar}{\lambda} \qquad (1)$$

Учтем, что по условию:

$$E_к = \eta \cdot \frac{2\pi c\hbar}{\lambda_0} \qquad (2)$$

Подставим (2) в (1):

$$\frac{2\pi c\hbar}{\lambda_0} - \eta\frac{2\pi c\hbar}{\lambda_0} = (1 - \eta)\cdot\frac{2\pi c\hbar}{\lambda_0} = \frac{2\pi c\hbar}{\lambda} \qquad (3)$$

Выразим из соотношения (3) длину волны рассеянного фотона:

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{1 - \eta} = \frac{4}{3}\cdot 3{,}64\ \text{пм} \qquad (4)$$

Найдем комптоновское смещение длины волны по формуле:

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda_0}{1 - \eta} - \lambda_0 = \frac{\eta\lambda_0}{1 - \eta} \qquad (5)$$

$$\Delta\lambda = \frac{4}{3}\cdot 3{,}64\text{пм} - 3{,}64\text{пм} = \frac{1}{3}\cdot 3{,}64\text{пм} = 1{,}21\ \text{пм} \qquad (6)$$

Используя другую формулу для комптоновского смещения длины волны, найдем угол θ, под которым рассеялся фотон:

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta) \qquad (7)$$

$$\cos\theta = 1 - \frac{\eta\lambda_0}{\lambda_c(1 - \eta)} \qquad (8)$$

Подставляя значение констант и соответствующих величин, получаем:

$$\cos\theta = 0{,}5,\ \text{то есть}\ \theta = 60^0 \qquad (9)$$

Ответ: $\Delta\lambda = 1{,}21$ пм, $\theta = 60^0$.

Волновые свойства частиц
Справочный материал к тестированию по теме

В предыдущем материале были представлены явления и эффекты, подтверждающие корпускулярные свойства света. Они проявляются, когда свет непосредственно взаимодействует с веществом (например, давление света, фотоэффект, эффект Комптона). Однако эксперименты также показали, что волновыми свойствами могут обладать не только механические и электромагнитные волны, но и некоторые элементарные частицы при определенных условиях. Этот факт также является подтверждением корпускулярно - волнового дуализма в природе. Впервые волновые свойства были обнаружены у фотонов рентгеновского излучения и электронов.

Изначально рентгеновским фотонам приписывались свойства частиц, которые образуются при бомбардировке анода рентгеновской трубки **быстрыми электронами**, ускоренными большой разностью потенциалов (порядка 10^5-10^6 эВ), созданной между анодом и катодом. Рентгеновское излучение, полученное таким образом, называется **тормозным**. Его **спектр** в отличие от характеристического рентгеновского излучения является **сплошным**. Впервые предположение о волновой природе рентгеновского излучения высказал Стокс. Окончательно это предположение было подтверждено Лауэ, который обнаружил **дифракцию рентгеновских лучей на кристалле**. Так как длина волн рентгеновского излучения очень мала (0,001÷10 нм), то их дифракция возможна только на очень малых объектах – атомах, молекулах, атомных остовах в узлах кристаллических решеток. В этом случае кристалл играет роль дифракционной решетки. Положение **дифракционных максимумов** в случае дифракции рентгеновского излучения на кристалле можно определить с помощью **условия Вульфа – Брэгга**. Как и в волновой оптике, вторичные рентгеновские лучи, отраженные от одной кристаллографической плоскости, будут усиливать друг друга при разности фаз 2π.

Выделяют **три метода наблюдения** дифракции рентгеновских волн на кристаллах: метод Лауэ, метод Брэгга и метод Дебая – Шерера.

В **методе Лауэ** монокристалл облучается немонохроматическим рентгеновским излучением при фиксированном угле падения. Дифракционная картина, полученная в этом методе, называется лауэграммой и представляет собой систему пятен. Вид лауэграммы зависит от структуры кристалла и длин волн рентгеновского излучения.

В **методе Брэгга** на монокристалл падает монохроматическое рентгеновское излучение, но под разными углами скольжения. Такое падение достигается либо за счет вращения кристалла, либо за счет вращения источника. При различных углах скольжения отражение, приводящие к усилению вторичных рентгеновских лучей, происходит от различных кристаллографических плоскостей.

В **методе Дебая – Шерера** монохроматическое излучение падает на поликристаллический порошок. Поликристаллический порошок состоит из большого числа монокристаллов. Среди этих монокристаллов найдутся такие, ориентация которых по отношению к падающему рентгеновскому излучению соответствует условию Вульфа – Брэгга.

Дифракция рентгеновского излучения на кристаллах позволила разработать устройства, с помощью которых можно измерять дины волн этого излучения зная структуру кристаллической решетки и наоборот изучать структуру

кристаллической решетки по известным длинам волн рентгеновского излучения и углам скольжения (рентгеноструктурный анализ).

Волновые свойства электронов впервые были обнаружены в **опытах Рамзауэра и Таунсенда.** Они исследовали упругое рассеяние электронов на атомах инертных газов (в частности Рамзауэр проводил исследования в 1921 г. на атомах аргона). Энергия электронов могла меняться в достаточно широком диапазоне. Так в опытах Рамзауэра она изменялась от меньше одного до нескольких десятков эВ. В опытах измерялась зависимость поперечного сечения упругого рассеяния электронов на молекулах газа от энергии налетающих электронов.

Поперечным сечением рассеяния σ называют вероятность попадания электрона в одну из молекул в элементарном слое dx вещества. В эксперименте поперечное сечение можно вычислить, зная концентрацию n_0 молекул вещества (инертного газа) в заданном объеме, толщину слоя вещества x и натуральный логарифм отношения интенсивности электронного пучка на входе в вещество $I(0)$ и на выходе из него $I(x)$. Кроме того поперечное сечение связано с концентрацией n_0 молекул вещества и средней длиной свободного пробега l. **Средней длиной свободного пробега** электрона называют путь, который он в среднем проходит среди молекул без соударений.

В классической физике величина поперечного сечения рассеяния экспоненциально убывает с ростом энергии налетающих частиц. В опыте Рамзауэра эта зависимость имеет другой характер. Вначале, при уменьшении энергии от нескольких десятков эВ до 16 эВ, сечение, как и в классической теории, растет, но, при дальнейшем уменьшении энергии, оно падает и при значении энергии в 1эВ достигает своего минимума и, затем, снова начинает увеличиваться. То есть вещество становится прозрачным для электронов с энергией в 1 эВ. Столкновения могут отсутствовать только в том случае, если электрон при таких энергиях ведет себя как волна, огибающая препятствие (молекулу). Следовательно, **электрон обладает определенными волновыми свойствами** при некоторых значениях его энергии, зависящих от рода вещества, на котором происходит рассеяние.

Впервые волновые и корпускулярные свойства частиц были сопоставлены в работах де Бройля. Он установил связь между основными корпускулярными характеристиками – энергией E и импульсом $\vec{p}$ частицы и основными волновыми характеристиками – частотой ω и волновым вектором $\vec{k}$ волны, соответствующей данной частице. Уравнения, связывающие эти величины, были названы **уравнениями де Бройля**. Поиск волновой модели, соответствующей реальной частице показал, что обычная **плоская монохроматическая волна** (мода) не может отвечать предъявляемым к ней свойствам, так как ее скорость (**фазовая**) может превышать скорость света. Фазовая скорость волн де Бройля всегда больше скорости света. **Фазовой скоростью** волны v_{ϕ} называют скорость, с которой движутся точки волны с постоянной фазой.

Скорость же реальной частицы, согласно второму постулату Эйнштейна, не может быть больше скорости света. Поэтому первой наиболее подходящей моделью стал **волновой пакет**.

Волновой пакет – это группа (совокупность) волн, волновые числа которых принимают ряд непрерывных значений в очень узком интервале: ($k_0 - \varepsilon$, $k_0 + \varepsilon$),

где k_0 - волновое число, отвечающее центру волнового пакета, ε - бесконечно малая величина разброса значений волнового вектора. Пространственные размеры пакета, тем больше чем меньше разброс векторов $\vec{k}$. В отличие от одной моды волновой пакет движется с **групповой скоростью** $v_{гр}$, которая совпадает со скоростью реальной частицы. При этом произведение групповой скорости $v_{гр}$ пакета на фазовую скорость $v_{ф}$ моды, соответствующей волновому числу k_0 равно скорости света в квадрате.

Волновой пакет в первом приближении движется без изменения формы. Если учесть более высокие порядки в разложении частоты по волновым векторам, то форма пакета должна изменяться со временем. Он будет расплываться в пространстве. Такое поведение не соответствует состоянию реальной частицы, которая должна иметь ограниченные и достаточно малые размеры в пространстве, следовательно, модель волнового пакета не может полностью отвечать реальной частице.

Волновые свойства электронов позволили обнаружить **дифракцию электронов на кристаллах**. Длина волны де Бройля λ этих частиц очень мала и может иметь порядок размеров атомов в кристаллах. Она зависит от величины ускоряющей разности потенциалов U (чем она больше, тем меньше длина волны). Эксперименты по дифракции электронов по своей структуре и сути напоминали эксперименты по дифракции рентгеновского излучения. В **опытах Дэвидсона и Джермера** дифракция электронов наблюдалась по **методу Брэгга**. **Томсон и Тартаковский** использовали поликристаллический порошок, который облучался монохроматическим электронным пучком, что соответствует **методу Дебая – Шерера**. Для описания дифракции электронов также можно использовать формулы Вульфа – Брэгга с учетом и без учета преломления. Они аналогичны формулам для дифракции рентгеновского излучения. Однако коэффициент преломления для электронных волн n будет зависеть от ускоряющего потенциала электрона U и внутреннего потенциала металла U_0 (кристаллической решетки). Это связано с тем, что при входе электрона в металл его кинетическая энергия $E_к$ увеличивается на величину работы выхода из металла A.

Для доказательства того факта, что дифракционная картина формируется за счет рассеянных электронных волн, а не вторичного рентгеновского излучения, возникающего при падении электронов на кристалл (фотоэффект) было использовано магнитное поле. Как известно оно не влияет на фотоны, но искажает траекторию электронов. Это приводит к искажению дифракционной картины. Данный факт и был обнаружен экспериментально. Кроме того количественная оценка опытов полностью подтвердила правильность уравнений де Бройля.

В экспериментах Дэвидсона и Джермера, Томсона и Тартаковского наблюдалась **дифракция электронных волн за счет деления амплитуды**. Как известно из оптики, кроме данного метода существует и **метод деления волнового фронта**. Он также был использован для наблюдения дифракции электронов. Дифракцию электронных волн на краю пленки Al_2O_3 наблюдал Берш [1], используя электроны с энергией 34 кэВ. В опытах Мелленштадта и Дюкера (1959 г.) [1] наблюдалась дифракция электронных волн, аналогичная дифракции, наблюдаемой с помощью бипризмы Френеля. Однако бипризма представляла собой неоднородное электростатическое поле, собирающие когерентные электронные

волны от двух мнимых источников в одной точке экрана. Количественные результаты этих опытов также подтвердили правильность уравнений де Бройля и корпускулярно – волновой дуализм, характерный для частиц.

Основные соотношения:

Условие Брэгга - Вульфа (без учета преломления): $2d\cos\theta = m\lambda$

где d - расстояние между кристаллографическими плоскостями, λ - длина волны рентгеновского излучения, m - порядок максимума дифракции.

Связь угла падения θ с углом скольжения α: $\theta = \pi/2 - \alpha$

Условие Брэгга - Вульфа (с учетом преломления): $2nd\cos\theta_{пр} = m\lambda$

где $\theta_{пр}$ - угол преломления в кристалле, n - показатель преломления кристалла.

Вероятность попадания электрона в молекулу: $dP = \sigma n_0 dx$

Средняя длина свободного пробега: $l = \dfrac{1}{\sigma n_0}$

Поперечное сечение упругого рассеяния электрона на атоме (молекуле): $\sigma = \dfrac{1}{n_0 x}\ln\dfrac{I(0)}{I(x)}$

Уравнение де Бройля для энергии и частоты: $E = \hbar\omega$

Уравнение де Бройля для импульса и волнового вектора: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

Фазовая скорость: $\mathrm{v}_{ф} = \dfrac{dx}{dt} = \dfrac{E}{p} = \dfrac{m_e c^2}{m_e \mathrm{v}} = c\dfrac{c}{\mathrm{v}}$

Математическое представление волнового пакета: $\Psi(x,t) = \dfrac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} A(k)\exp\{-i[\omega(k)t - kx]\}dk$

Групповая скорость: $\mathrm{v}_{гр} = \dfrac{d\omega}{dk} = \dfrac{dE}{dp} = \mathrm{v}$

Связь групповой и фазовой скорости: $\mathrm{v}_{ф}\cdot\mathrm{v}_{гр} = c^2$

Длина волны де Бройля (для электрона): $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}}$

где m_e - масса электрона

Формула Вульфа - Брэгга для электронных волн (без учета преломления): $m\lambda_m = 2d\sin\alpha$

Уравнение для максимумов отражения (без учета преломления волн): $\sqrt{U_m} = \dfrac{\pi\hbar}{d\sin\alpha\sqrt{2em_e}}\cdot m = const\cdot m$

Формула Вульфа - Брэгга для электронных волн (с учетом преломления): $m\lambda_m = 2d\sqrt{n^2 - \cos^2\alpha}$

где $n = \left(1 + \frac{U_0}{U}\right)^{1/2}$, U_0 - внутренний потенциал металла, в который попадает ускоренный электрон, U - ускоряющий потенциал электрона.

Связь внутреннего потенциала с работой выхода A: $U_0 = \frac{A}{e}$

Связь ускоряющего потенциала

с кинетической энергией электрона $E_к$: $U = \frac{E_к}{e}$

Варианты тестов промежуточного контроля по теме

ТЕСТ№1

1. В каких физических явлениях проявляются корпускулярные свойства частиц?
2. Какое условие позволяет определить положение дифракционных максимумов в случае дифракции рентгеновского излучения на кристалле?
3. В чем заключается суть метода Лауэ?
4. Вероятность попадания электрона в одну из молекул в элементарном слое dx вещества называют _____.
5. Поперечное сечение упругого рассеяния электрона на атоме (молекуле) определяется выражением вида: _____.
6. Как связаны угол падения θ с углом скольжения α?
7. Что называют волновым пакетом?
8. Условие Брэгга - Вульфа (без учета преломления) имеет вид: _____.
9. Напишите выражение для групповой скорости волнового пакета.
10. Связь внутреннего потенциала с работой выхода имеет вид: _____.

ТЕСТ№2

1. У каких частиц впервые были обнаружены волновые свойства?
2. Перечислите методы наблюдения дифракции рентгеновских волн на кристаллах.
3. Что называют средней длиной свободного пробега?
4. Какие величины связаны уравнением де Бройля?
5. Пространственные размеры пакета, тем больше чем _____ разброс векторов $\vec{k}$.
6. Связь групповой и фазовой скорости имеет вид: _____.
7. По какому методу наблюдалась дифракция электронов в опытах Дэвидсона и Джермера?
8. Почему модель волнового пакета не может полностью описывать поведение реальной частицы?
9. Уравнение де Бройля для энергии и частоты имеет вид: _____.
10. Формула Вульфа - Брэгга для электронных волн (с учетом преломления) имеет вид: _____.

ТЕСТ№3

1. Какое рентгеновское излучение называется тормозным?

2. Какая зависимость измерялась в опытах Рамзауэра и Таунсенда?
3. Какова должна быть разность фаз у вторичных рентгеновских лучей, чтобы при отражении от кристаллографической плоскости они усиливали друг друга?
4. В чем заключается суть метода Дебая – Шерера?
5. Напишите выражение, которым определяется средняя длина свободного пробега.
6. Скорость, с которой движутся точки волны с постоянной фазой называется _____.
7. Математическое представление волнового пакета имеет вид: _____.
8. В каких опытах наблюдалась дифракция электронных волн за счет деления амплитуды?
9. Длина волны де Бройля (для электрона)определяется выражением: _____.
10. Уравнение де Бройля для импульса и волнового вектора имеет вид: _____.

ТЕСТ№4

1. В каком физическом явлении подтвердилась волновая природа рентгеновского излучения?
2. Какова длина волны рентгеновского излучения?
3. В чем заключается суть метода Брэгга?
4. Какие опыты показали волновую природу электрона?
5. С какой целью в дифракционных опытах использовалось магнитное поле?
6. От каких величин зависит расстояние между кристаллографическими плоскостями (постоянная решетки) в формуле Брэгга - Вульфа (с учетом преломления)?
7. Как называется скорость движения волнового пакета?
8. Какая из скоростей (фазовая или групповая) может превышать значение скорости света?
9. Напишите выражение для фазовой скорости волнового пакета.
10. Связь ускоряющего потенциала с кинетической энергией электрона определяется соотношением: _____.

Примеры заданий с решениями по теме

Задание №1. Протон с длиной волны упруго рассеялся под углом 90^0 на первоначально покоившейся частице, масса которой в $n = 4$ раза больше массы протона. Определить длину волны рассеянного протона.

Решение:

В данной задаче используются законы сохранения энергии и импульса и соотношения де Бройля. Изобразим векторную диаграмму рассматриваемого упругого соударения.

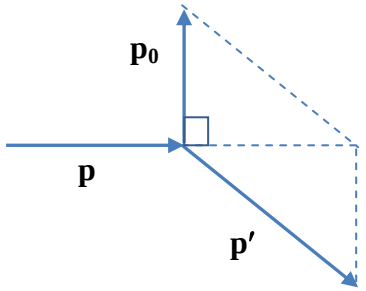

рис.1

Запишем закон сохранения импульса:

$$p'^2 = p_0^2 + p^2 \qquad (1)$$

где $\vec{p}'$ - импульс частицы, $p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ - соотношение де Бройля для падающего протона, $p_0 = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_0}$ - соотношение де Бройля для рассеянного протона.

Закон сохранения энергии имеет вид (нерелятивистский случай):

$$\frac{p^2}{2m_p} - \frac{p_0^2}{2m_p} = \frac{p'^2}{2nm_p} \qquad (2)$$

Выразим из (2) импульс частицы:

$$p'^2 = n\left(p^2 - p_0^2\right) \qquad (3)$$

Подставим (3) в (1):

$$n\left(p^2 - p_0^2\right) = p_0^2 + p^2 \qquad (4)$$

Из (4) выразим импульс p_0 через p:

$$(n-1)p^2 = p_0^2(n+1) \qquad (5)$$

$$p_0 = p\sqrt{\frac{n-1}{n+1}} \qquad (6)$$

Подставим в (6) соотношения де Бройля:

$$\lambda_0 = \lambda\sqrt{\frac{n+1}{n-1}} \qquad (7)$$

Подставим значения и получим искомую длину волны:

$$\lambda_0 = 1{,}7\ \text{пм}\sqrt{\frac{4+1}{4-1}} = 2{,}2\ \text{пм} \qquad (8)$$

Ответ: $\lambda_0 = 2{,}2$ пм

Задание №2. Найти кинетическую энергию электронов, падающих нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, если на экране, отстоящем от диафрагмы на $l = 75$ см, расстояние между соседними максимумами $\Delta x = 7{,}5$ мкм. Расстояние между щелями $d = 25$ мкм.

Решение:

Сделаем рисунок к данной задаче согласно ее условию.

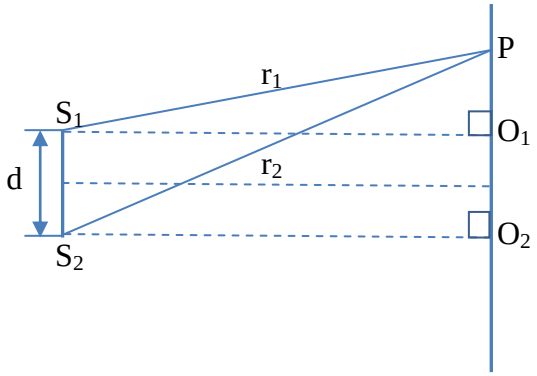

рис.2

По условию задачи электронные волны интерферируют, таким же образом как электромагнитные в опыте Юнга. Следовательно, расстояние между соседними максимумами можно связать с длиной волны де Бройля для электронов и, зная ее, рассчитать импульс и кинетическую энергию, воспользовавшись соотношениями де Бройля.

Пусть расстояние между щелями S_1 и S_2 равно d. Тогда, как видно из построения, делится d на две равные половины относительно центра экрана. Найдем положение максимумов, рассматривая разность хода между лучами, идущими от S_1 и S_2:

$$\Delta = r_2 - r_1 \qquad (1)$$

Расстояния r_1 и r_2 являются гипотенузами прямоугольных треугольников $\Delta S_1 PO_1$ и $\Delta S_2 PO_2$. Для них можно написать теорему Пифагора и рассмотреть разность их квадратов:

$$r_1^2 = l^2 + \left(x - \frac{d}{2}\right)^2 \qquad (2)$$

$$r_2^2 = l^2 + \left(x + \frac{d}{2}\right)^2 \qquad (3)$$

$$r_2^2 - r_1^2 = (r_2 - r_1)(r_2 + r_1) = l^2 + \left(x + \frac{d}{2}\right)^2 - l^2 - \left(x - \frac{d}{2}\right)^2 = 2xd \qquad (4)$$

Учитывая соотношение (1) и то, что по условию наблюдения устойчивой интерференционной картины $d << l$ и, поэтому, $r_1 \approx r_2 \approx l$ из соотношения (4) можно получить:

$$2l\Delta = 2xd \qquad (5)$$

Отсюда положение точки P можно определить по формуле:

$$x = \frac{\Delta \cdot l}{d} \qquad (6)$$

Шириной интерференционной полосы называют расстояние между соседними минимумами. Оно же соответствует и расстоянию между соседними максимумами. Следовательно, используя условие для соседних максимумов или минимумов, можно получить Δx:

$$\Delta x = \frac{\lambda \cdot l}{d} \qquad (7)$$

Выразим из (7) длину волны:

$$\lambda = \frac{\Delta x \cdot d}{l} \qquad (8)$$

С помощью соотношения де Бройля найдем импульс электронов:

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar l}{\Delta x \cdot d} \qquad (9)$$

Найдем кинетическую энергию электрона по формуле:

$$E_к = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{2\pi^2\hbar^2 l^2}{m_e \Delta x^2 d^2} \qquad (10)$$

Подставим в (10) соответствующие значения величин и найдем искомую энергию:

$$E_к = \frac{2 \cdot 9{,}86 \cdot 1{,}1 \cdot 10^{-68}\,\text{Дж}^2 \cdot \text{с}^2 \cdot 0{,}5625\ \text{м}^2}{9{,}31 \cdot 10^{-31}\,\text{кг} \cdot 56{,}25 \cdot 10^{-12}\,\text{м}^2\, 625 \cdot 10^{-12}\,\text{м}^2} = 3{,}73 \cdot 10^{-18}\,\text{Дж} = 23{,}3\ \text{эВ}$$

Ответ: $E_к = 23{,}3$ эВ

Задание №3. Частица массой m движется в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы *l*. Найти значения энергии частицы, имея в виду, что возможны лишь такие состояния, для которых в яме укладывается целое число дебройлевских полуволн.

Решение:

По условию задачи выполняется соотношение:

$$l = n\frac{\lambda}{2} \qquad (1),$$

где $n \in N$.

Выразим из (1) длину волны и, используя уравнение де Бройля для импульса, найдем его:

$$\lambda = \frac{2l}{n} \qquad (2)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{\pi\hbar n}{l} \qquad (3)$$

Учитывая, что внутри ямы частица совершает свободное движение (обладает только кинетической энергией), найдем ее энергию по формуле:

$$E_n = \frac{{p_n}^2}{2m_e} \qquad (4)$$

Подставим в (4) соотношение (3) и окончательно получим:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m_e l^2} \qquad (5)$$

Из соотношения (5) видно, что энергия частицы квантована, то есть определяется рядом дискретных значений. Соотношение (6) совпадает с энергией частицы в прямоугольной квантовой яме с бесконечными стенками в одномерном случае, полученной при решении квантовомеханического стационарного уравнения Шредингера.

Ответ: $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m_e l^2}$

Классическое описание атома водорода и водородоподобных атомов и систем
Справочный материал к тестированию по теме

С точки зрения современных представлений атом является сложной структурой. Он состоит из ядра (положительно заряженная часть атома) и электронов (отрицательно заряженная часть атома). Между ядром и электронами устанавливается **кулоновское** (электрическое) взаимодействие. Кроме того, электроны взаимодействуют между собой. Это взаимодействие намного слабее того, что возникает между ядром и электронами. Однако и оно вносит поправки в энергетический спектр атома. **Количество электронов в атоме** равно порядковому номеру химического элемента, соответствующему данному атому в таблице Менделеева. Порядковый номер элемента обозначается буквой Z.

Атом - нейтральная структура. Это означает, что заряд ядра полностью компенсируется суммарным зарядом электронов. **Полный заряд ядра равен $Z \cdot e$,** где $e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$Кл – заряд электрона, взятый с положительным знаком.

Атомные модели строились так, чтобы выполнялось **условие электронейтральности** атома. Вначале предполагалось, что атом представляет собой равномерно распределенный по объему шара положительный заряд, в который вкраплены электроны таким образом, чтобы выполнялось условие электронейтральности (**модель Томсона**).

Затем **Резерфорд**, проводя **опыты по рассеянию α-частиц** (ядра гелия) на атомах мишени, обнаружил не соответствие экспериментальных данных существующей модели Томсона. Оказалось, что некоторая часть частиц рассеивается под углами близкими к 180^0. Число рассеянных частиц в соответствующем направлении и соответствующее ему дифференциальное поперечное сечение описывается формулами Резерфорда. Такое рассеяние возможно, только в том случае, если в атоме существует положительный точечный центр, в котором сосредоточена вся его масса. Этим центром оказалось ядро атома, а суммарная масса электронов пренебрежимо мала по сравнению с массой этого ядра.

Таким образом, возникла **планетарная модель,** с точки зрения которой, атом представляет собой сложную структуру, состоящую из ядра, и, вращающихся относительно него под действием кулоновских сил притяжения по стационарным круговым орбитам, электронов.

Такая модель не нашла объяснения в классической теории. Электрон, являясь заряженной частицей и двигаясь с нормальным ускорением по круговой орбите относительно ядра должен непрерывно излучать и в итоге, упасть на него. При этом спектр атома должен быть сплошным. Однако известно, что **атом довольно устойчивая структура и его спектр дискретный**.

Дискретность атомных состояний (спектра) была обнаружена **в опытах Франка – Герца**. В их экспериментах исследовались неупругие столкновения электронов с парами ртути, а затем и других веществ. Установка состояла из горячего катода, сетки – анода и электрода, находящегося за сеткой, к которому присоединен амперметр. Все электроды помещались в колбу, заполненную парами ртути с достаточно низким давлением.

Между катодом и сеткой - анодом прикладывалось ускоряющее (прямое) напряжение для электронов, а между сеткой – анодом и электродом –

задерживающее напряжение. Если электроны испытывали неупругие столкновения с парами ртути, то они теряли часть энергии и не могли преодолеть задерживающую разность потенциалов, что приводило к спаду тока, регистрируемого амперметром, при упругих же столкновениях ток начинал расти.

Вольт – амперная характеристика (ВАХ) в опытах Франка - Герца имела периодический осциллирующий характер. Расстояние между соседними максимумами и минимумами силы тока (разность потенциалов) оказалось одинаковым. Оно соответствовало энергетическому расстоянию между основным состоянием атома ртути и его первым возбужденным состоянием. Эта характерная для атомов каждого вещества разность потенциалов была названа **резонансным потенциалом**. Первый максимум ВАХ был сдвинут на некоторую величину из-за наличия **контактной разности потенциалов** между материалами катода и анода. Она возникает, когда анод и катод изготавливаются из различных материалов.

Многочисленные эксперименты такого рода в итоге показали, что **состояния атомов меняются дискретно**.

Кроме данных экспериментов, дискретность атомных состояний подтверждались в исследованиях спектров излучения атомов и молекул. Как известно, существуют **два вида излучения атомов**: 1) **тепловое**, возникающее за счет соударений атомов и молекул (кинетическая (тепловая) энергия атома преобразуется в энергию излучения) и 2) **люминесценция** – излучение, возникающее за счет не тепловой энергии. **Спектры молекул** являются **полосатыми**. Они состоят из широких полос с размытыми краями. **Спектры** же отдельных **атомов** являются **линейчатыми**, и состоят из резких линий. У каждого атома свой характерный набор таких линий. Он не зависит от способа возбуждения атома.

Закономерности в линейчатых спектрах впервые были обнаружены Бальмером эмпирическим путем. Он показал, что отдельные линии можно объединять в группы, которые впоследствии были названы **сериями**. Всякая серия связана с переходами атома из возбужденных состояний на некоторый определенный уровень, характеризуемый целым числом. Каждой серии соответствует свой спектральный диапазон. Так серия Бальмера (переход с возбужденных уровней на второй) отвечает видимому диапазону спектра атома водорода, серия Лаймана (переход с возбужденных уровней на первый) – ультрафиолетовому диапазону, серии Пашена (переход с возбужденных уровней на третий), Брэкета (переход с возбужденных уровней на четвертый) и Пфунда (переход с возбужденных уровней на пятый) – инфракрасному диапазону. Опытным путем было установлено, что каждая **частота,** соответствующая той или иной спектральной линии, есть разность двух величин, зависящих от целого числа, которые называют **спектральными термами**.

На основе этих данных Ритц сформулировал правило, которое называется **комбинационным принципом Ритца**: Все линии в спектре излучения атома (излучаемые частоты) могут быть представлены как комбинации спектральных термов. Однако обратное утверждение не является верным, так как некоторые комбинации термов запрещены правилами отбора.

Дискретность характеристик атомов также была подтверждена опытами **Штерна – Герлаха,** в которых производилось измерение магнитного момента атома. Опыт проводился с атомами серебра. Пучок атомов, разогретых до высоких температур, проходил через коллиматор - систему диафрагм и направлялся между

полюсами магнита, создающего неоднородное магнитное поле. Это поле влияло на ориентацию магнитных моментов отдельных атомов. Эксперимент проводился в условиях высокого вакуума. Атомы серебра, прошедшие поле, осаждались на экране. Результаты опыта отличались от тех выводов, которые могли следовать из классической теории. Магнитные моменты не принимали весь возможный ряд непрерывных значений, как это следовало из классических представлений. **Ориентация магнитных моментов** относительно магнитного поля **изменялась дискретно**. Это явление получило в дальнейшем название **пространственного квантования**. Пространственное квантование сыграло немаловажную роль в построении векторной модели атомов.

Чтобы объяснить возникшее несоответствие в попытках классического токования опытов Резерфорда и экспериментальном материале, подтверждающим дискретность атомных состояний, Бор выдвинул свои постулаты, которые легли в основу квазиклассической модели атома водорода и водородоподобных систем.

Постулаты Бора:

1. Все электроны в атомах движутся по разрешенным стационарным орбитам под действием кулоновских сил.
2. Переход атома из одного состояние в другое сопровождается скачкообразным поглощением или выделением энергии.
3. Радиусы разрешенных орбит определяются из условия квантования орбитального момента импульса электрона.

Самым простейшим атомом считается атом водорода, так как у него всего один электрон и ядро. Поэтому при описании такого атома можно учитывать только кулоновское взаимодействие между электроном и ядром. В этом случае **полная энергия атома** будет определяться суммой кинетической энергии электрона в атоме водорода и потенциальной энергии поля кулоновских сил воздействующих на электрон.

Учитывая третий постулат Бора (правило круговых орбит Бора Зоммерфельда) и II закон Ньютона можно найти зависимость полной энергии атома от главного квантового числа и показать, что энергия атома квантована (уровни дискретны). Отрицательный знак в соотношении для полной энергии указывает на то, что электрон локализован в пространстве у ядра и его движение является финитным.

Если учитывать **конечность массы ядра**, то в формуле для полной энергии атома водорода вместо массы электрона будет стоять **приведенная масса системы ядро – электрон**, которая меньше массы электрона. Это приведет к смещению спектральных линий относительно их положения без учета движения ядра. Таким образом, спектры **изотопов** окажутся различимыми (их спектральные линии сдвинуться относительно друг друга), что и наблюдается в экспериментах. Такой сдвиг линий называется **изотопическим**. **Изотопами** называют элементы с одинаковым числом протонов и различным числом нейтронов в ядре. Изотопами **атома водорода** являются **дейтерий** и **тритий**. По изотопическому сдвигу можно вычислить массу изотопов, а по их интенсивности концентрацию изотопов в смеси.

Теория Бора позволила изменить представление о структуре атома и хорошо описывала только водородоподобные атомы и системы. Однако она не давала объяснений многим явлениям, возникающим из-за сложности структуры многоэлектронных атомов. С этой целью была разработана квантовая теория, которая позволила объяснить эти явления.

Водородоподобными атомами и системами называют структуры, состоящие из двух противоположно заряженных объектов, между которыми действуют центральные силы притяжения – кулоновские. Простейшим и устойчивым водородоподобным атомом является **атом водорода**, к которому применима квазиклассическая теория Бора. К **водородоподобным системам** также относятся: изотопы водорода, водородоподобные ионы, позитроний и мюоний, мюонные атомы, адронные атомы, Ридберговские атомы. Для всех водородоподобных систем полная энергия и радиус орбиты определяются по тем же квазиклассическим формулам, что и для атома водорода. Однако приведенная масса систем и их заряды могут отличаться.

Радиус разрешенных орбит (боровский радиус) и полная энергия у **изотопов дейтерия и трития** примерно такая же, как и у атома водорода. Если учитывать конечность (движение) массы ядра, то небольшое отличие значений связано с **изотопическим сдвигом** спектральных линий.

Водородоподобные ионы - это системы, состоящие из ядер различных элементов и одного электрона в нижайшем состоянии. Их полная энергия **в** Z^2 **раз больше**, а радиус первой боровской орбиты **в** Z **раз меньше**, чем у атома водорода, если не учитывать конечность массы ядра. При учете конечности массы ядра возникнет небольшая поправка, обусловленная различием приведенных масс.

Позитроний – система, состоящая их электрона и его античастицы – позитрона. Она имеет такую же массу и размеры, как электрон и противоположный электрический заряд. Так как массы одинаковы, то обязательно нужно учитывать конечность массы ядра, роль которого играет позитрон. Приведенная масса такой системы в два раза меньше массы электрона. Следовательно, полная энергия позитрона **в два раза меньше**, а радиус первой боровской орбиты **в два раза больше**, чем у атома водорода. Такая система нестабильна, так как позитрон и электрон могут аннигилировать с образованием двух или трех фотонов.

Мюоний – система из ядра - положительного мюона (его масса соизмерима с массой протона) и электрона. Мюон относится к тому же классу фундаментальных фермионов, что и электрон – к классу лептонов. Однако в отличие от электрона он является нестабильным. Его время жизни – 2.2 мкс. Поэтому мюоний также нестабилен. Полная энергия и первый боровский радиус у мюония такие, как и у водорода с учетом конечности массы ядра и без.

Мюонным атомом называют систему, состоящую из атомного ядра и отрицательного мюона, масса которого в 207 раз больше, чем у электрона. Радиус первой боровской орбиты такой системы уменьшается, а полная энергия увеличивается. Из-за нестабильности мюона, такой атом тоже является нестабильным. Так как радиус у такой системы очень мал и может находиться внутри ядра, спектр системы оказывается зависимым от структуры ядра, что позволяет использовать мюонные атомы для ее изучения.

Адронным атомом называют систему, в которой электрон замещен отрицательным адроном. Адроны в отличие от лептонов структурные частицы. Они состоят из двух – трех кварков. Протон и нейтрон относятся к адронам, состоящим из трех кварков. Массы адронов соизмеримы с массами протонов и нейтронов и, следовательно, их приведенные массы также достаточно велики. Поэтому полная энергия адронных атомов увеличивается, а первый боровский радиус уменьшается. В адронных атомах больше проявляется сильное

взаимодействие для нижайших состояний. При сильном возбуждении более значительным становится кулоновское взаимодействие.

Ридберговским атомом называют атом, электрон которого находится в сильно возбужденном состоянии. При этом ядро и внутренние электроны образуют атомный остов с положительным зарядом равным по модулю заряду электрона. Радиус таких атомов в n^2 раз больше, а энергия в n^2 раз меньше, чем у атома водорода (n - главное квантовое число, номер соответствующего возбужденного уровня).

Основные соотношения:

Связь между прицельным параметром b и углом рассеяния θ

в формуле Резерфорда (в СИ) $$ctg\left(\frac{\theta}{2}\right) = \left(4\pi\varepsilon_0 m_\alpha \mathrm{v}^2 / 2Ze^2\right)\cdot b,$$

где m_α и v - соответственно масса и скорость налетающей α – частицы, Z - порядковый номер элемента мишени.

Формула Резерфорда для относительного

числа частиц $$\frac{dN_\theta}{N} = n\left(Ze^2 / 4\pi\varepsilon_0 m_\alpha \mathrm{v}^2\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\theta/2)},$$

где $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ - элемент телесного угла, в котором рассеиваются dN_θ α – частиц в пределах углов θ и $\theta + d\theta$, n – концентрация атомов мишени в единице объема, N – полный поток α – частиц, рассеиваемых на мишени.

Формула Резерфорда для дифференциального поперечного

сечения рассеяния $$d\sigma = \left(Ze^2 / 4\pi\varepsilon_0 m_\alpha \mathrm{v}^2\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\theta/2)}$$

Спектральный терм атома водорода $$T(n) = R/n^2$$

Спектральный терм атомов щелочных металлов $$T(n) = R/(n+\alpha)^2$$

Комбинационный принцип Ритца $$\omega_{mn} = T(n) - T(m)$$

Спектральная серия Бальмера $$\omega_{n2} = R\left(1/2^2 - 1/n^2\right)$$
(где $n=3,4,5,6\ldots$)

Спектральная серия Лаймана $$\omega_{n1} = R\left(1 - 1/n^2\right)$$
(где $n=2,3,4,5\ldots$)

Спектральная серия Пашена $$\omega_{n3} = R\left(1/3^2 - 1/n^2\right)$$
(где $n=4,5,6,7\ldots$)

Спектральная серия Брэкета $$\omega_{n4} = R\left(1/4^2 - 1/n^2\right)$$
(где $n=5,6,7,8\ldots$)

Спектральная серия Пфунда $$\omega_{n5} = R\left(1/5^2 - 1/n^2\right)$$
(где $n=6,7,8,9\ldots$)

Второй постулат Бора $$E_n - E_m = \hbar\omega_{mn}$$

где n и m - номера соответствующих уровней, на которых находится электрон в атоме.

Правило квантования круговых орбит

(третий постулат Бора) $$m\mathrm{v}r = n\hbar$$

где n - главное квантовое число, v - скорость электрона, r - радиус его орбиты, m - его масса.

II закона Ньютона для электрона в водородоподобном атоме $$\frac{m\mathrm{v}^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

где Z - порядковый номер элемента, ε_0 - постоянная диэлектрическая проницаемость.

Радиус стационарной боровской орбиты $$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2\hbar^2}{Ze^2 m}$$

Кинетическая энергия электрона в атоме водорода $$T = \frac{m\mathrm{v}^2}{2}$$

Потенциальная (кулоновская) энергия в атоме водорода $$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Полная энергия стационарных состояний электрона

в водородоподобном атоме $$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{32\cdot\pi^2\varepsilon_0^2 n^2\hbar^2}$$

Постоянная Ридберга для водородоподобного атома $$R = \frac{Z^2 e^4 m}{32\cdot\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3}$$

Полная энергия с учетом конечности

массы ядра $$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{32\cdot\pi^2\varepsilon_0^2 n^2\hbar^2}$$

где $\mu = \frac{m\cdot M}{m+M}$ - приведенная масса ядра и электрона. Она меньше не только массы ядра M, но и массы электрона m.

Постоянная Ридберга с учетом конечности

массы ядра $$R = \frac{Z^2 e^4 \mu}{32\cdot\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3}$$

Связь между магнитным $\vec{\mu}$ и механическим моментом $\vec{L}$

в классической теории для электрона: $$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L} = -\frac{\mu_Б \vec{L}}{\hbar}$$

где m - масса электрона.

Магнетон Бора: $$\mu_Б = \frac{e\hbar}{2m}$$

Варианты тестов промежуточного контроля по теме

ТЕСТ№1

1. Из чего состоит атом с точки зрения планетарной модели Резерфорда?
2. В чем заключается основной принцип построения атомной модели?
3. Что называют резонансным потенциалом?
4. Какие спектры имеют молекулы?

5. В чем заключается комбинационный принцип Ритца?
6. Сформулируйте первый постулат Бора.
7. Как называются изотопы атома водорода?
8. Какой атом называют Ридберговским атомом?
9. Связь между механическим и магнитным моментом определяется соотношением: _____.
10. Полная энергия стационарных состояний электрона в водородоподобном атоме определяется выражением вида: _____.

ТЕСТ№2

1. Какое взаимодействие устанавливается между ядром и электронами?
2. Какие опыты стали основой для возникновения планетарной модели атома?
3. Как называется излучение, возникающее за счет соударений атомов и молекул?
4. Что называют спектральной серией?
5. Правило квантования круговых орбит (третий постулат Бора) имеет вид: _____?
6. Что представляет собой атом в структурном отношении_____.
7. Система, состоящая их электрона и его античастицы (позитрона) носит название _____.
8. Радиус стационарной боровской орбиты определяется выражением: _____.
9. Магнетон Бора определяется соотношением: _____.
10. Чему равна приведенная масса водородоподобного атома?

ТЕСТ№3

1. Как определить количество электронов в атоме с помощью таблицы Менделеева?
2. В каких опытах впервые была обнаружена дискретность атомных состояний?
3. Как называется излучение, возникающее за счет не тепловой энергии?
4. Каковы спектры атомов?
5. Какому постулату Бора соответствует выражение $E_n - E_m = \hbar\omega_{mn}$?
6. Что показывает отрицательный знак в соотношении для полной энергии атома?
7. Какие системы называют водородоподобными ионами?
8. Потенциальная кулоновская энергия в атоме водорода имеет вид: _____.
9. Полная энергия с учетом конечности массы ядра определяется выражением: _____
10. Что представляет собой адронный атом?

ТЕСТ№4

1. Чему равен полный заряд ядра?
2. Какой характер имеет вольт – амперная характеристика (ВАХ) в опытах Франка – Герца?
3. Многочисленные эксперименты, подобные опытам Франка – Герца, в итоге показали, что состояния атомов меняются _____.
4. Что называют спектральными термами?
5. Какая величина определяется суммой кинетической энергии электрона в атоме водорода и потенциальной энергией поля кулоновских сил, воздействующих на электрон?
6. Приведите примеры водородоподобных систем.

7. Система из ядра - положительного мюона (его масса соизмерима с массой протона) и электрона называется _____.
8. Что представляет собой мюонный атом?
9. Чем отличается спектральный терм атома водорода от спектрального терма атома щелочного металла?
10. Общее соотношение для серии Бальмера имеет вид: _____.

Примеры заданий с решениями по теме

Задание №1. α - Частица с кинетической энергией T налетает с прицельным параметром $0{,}9\cdot10^{-11}$ см на покоящееся ядро свинца. Найти модуль приращения вектора импульса рассеянной α - частицы, если $T=2{,}3$ МэВ. При каком значении T модуль приращения вектора импульса рассеянной α - частицы будет максимальным для данного прицельного параметра? Каков при этом угол рассеяния?

Решение:

Изобразим векторную диаграмму процесса рассеяния, учитывая, что импульс частицы не изменяется по модулю и меняет лишь свое направление.

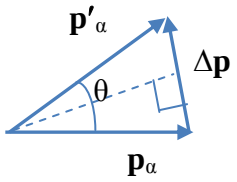

рис. 3

Тогда, как видно из рисунка, треугольник, построенный на импульсах, является равнобедренным с основанием равным модулю приращения вектора импульса Δp. Если обозначить угол рассеяния как θ, то модуль приращения будет равен:

$$\Delta p = 2p_\alpha \sin(\theta/2) \qquad (1)$$

Импульс α - частицы в нерелятивистском случае выражается через кинетическую энергию по формуле:

$$p_\alpha = \sqrt{2m_\alpha T} \qquad (2)$$

Подставим (2) в (1) и получим:

$$\Delta p = 2\sqrt{2m_\alpha T}\sin(\theta/2) \qquad (3)$$

Угол рассеяния выразим из формулы для прицельного параметра:

$$ctg\left(\frac{\theta}{2}\right) = \left(4\pi\varepsilon_0 T/Ze^2\right)\cdot b \qquad (4)$$

Из основного тригонометрического соотношения и формулы (4) следует, что:

$$\sin(\theta/2) = \left(\sqrt{1+ctg^2(\theta/2)}\right)^{-1} = \left(\sqrt{1+\left[4\pi\varepsilon_0 Tb/Ze^2\right]^2}\right)^{-1} \qquad (5)$$

Подставим (5) в (3) и найдем искомый модуль приращения импульса:

$$\Delta p = \frac{2\sqrt{2m_\alpha T}}{\sqrt{1+\left[4\pi\varepsilon_0 Tb/Ze^2\right]^2}} = 1{,}3\cdot 10^2 \text{ МэВ/с} \qquad (6)$$

Чтобы удовлетворить условию задачи и найти значение кинетической энергии, при котором модуль приращения импульса будет максимальным, возьмем от (6) производную по кинетической энергии и приравняем ее к нулю:

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial T} = \left(\frac{2\sqrt{2m_\alpha T}}{\sqrt{1+\left[4\pi\varepsilon_0 Tb/Ze^2\right]^2}}\right)' = 0 \qquad (7)$$

Решение уравнения (7) дает:

$$T = Ze^2/4\pi\varepsilon_0 b = 1{,}3 \text{ МэВ} \qquad (8)$$

Подставим (8) в (4) и получим:

$$ctg\left(\frac{\theta}{2}\right) = \left(4\pi\varepsilon_0 Ze^2/Ze^2 4\pi\varepsilon_0 b\right)\cdot b = 1 \qquad (9)$$

Следовательно, угол рассеяния равен: $\theta = \pi/2$

Ответ: $\Delta p = 1{,}3\cdot 10^2$ МэВ/с, $T = 1{,}3$ МэВ, $\theta = \pi/2$.

Задание №2. У какого водородоподобного иона разность длин волн головных линий серии Бальмера и Лаймана равна 59,3 нм

Решение:

Головные линии серий Бальмера и Лаймана образуются при переходе между основным уровнем каждой серии и ее первым возбужденным уровнем. Для серии Лаймана, которая соответствует ультрафиолетовому диапазону, частота перехода определяется соотношением:

$$\omega_{n1} = R\left(1 - 1/n^2\right) \qquad (1)$$

В случае головной серии n=2 и (1) примет вид:

$$\omega_{21} = R\left(1 - 1/2^2\right) = 3\cdot R/4 \qquad (2)$$

Для серии Бальмера, которая соответствует видимому диапазону, частота перехода равна:

$$\omega_{n2} = R\left(1/2^2 - 1/n^2\right) \qquad (3)$$

Для головной линии она равна:

$$\omega_{32} = R\left(1/2^2 - 1/3^2\right) = 5\cdot R/36 \qquad (4)$$

Используя соотношение, связывающее длину волны и частоту, найдем длины волн соответствующих серий:

$$\lambda_{21} = \frac{2\pi c}{\omega_{21}} = \frac{8\pi c}{3\cdot R} \qquad (5)$$

$$\lambda_{32} = \frac{2\pi c}{\omega_{32}} = \frac{72\pi c}{5\cdot R} \qquad (6)$$

Воспользуемся условие задачи:

$$\Delta\lambda = \lambda_{32} - \lambda_{21} = \frac{72\pi c}{5\cdot R} - \frac{8\pi c}{3\cdot R} = \frac{176\pi c}{15\cdot R} \qquad (7)$$

Выразим постоянную Ридберга, которая содержит порядковый номер водородоподобного иона:

$$R = \frac{176\pi c}{15 \cdot \Delta\lambda} \qquad (8)$$

По определению постоянная Ридберга равна:

$$R = \frac{Z^2 e^4 m}{32 \cdot \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \qquad (9)$$

Подставим (9) в (8) и выразим порядковый номер элемента *Z*:

$$\frac{Z^2 e^4 m}{32 \cdot \pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} = \frac{176\pi c}{15 \cdot \Delta\lambda} \qquad (10)$$

Отсюда:

$$Z = \sqrt{\frac{176 \cdot 32\pi^3 c \varepsilon_0^2 \hbar^3}{15 \cdot \Delta\lambda \cdot e^4 m}} \qquad (11)$$

Подстановка значений и мировых констант дает результат:

$$Z = 3 \qquad (12)$$

Такой порядковый номер имеет водородоподобный ион лития Li^{++}.

Ответ: Искомый водородоподобный ион – это ион лития Li^{++}.

Задание №2. Найти для позитрония: а) расстояние между частицами в основном состоянии; б) ионизационный потенциал и первый потенциал возбуждения; в) постоянную Ридберга и длину волны резонансной линии.

Решение:

Как известно, позитроний – система, состоящая их электрона и его античастицы – позитрона. Эта система вращается вокруг центра инерции. Запишем для этой системы закон сохранения энергии, второй закон Ньютона относительно центра масс и правило квантования круговых орбит:

$$E = \frac{\mu v^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (1)$$

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad (2)$$

$$\mu v r = n\hbar \qquad (3)$$

где $\mu = m_e/2$ - приведенная масса электрона и позитрона.

Решая систему из уравнений (1) – (3) с учетом значения приведенной массы можно найти энергетический спектр и радиусы орбит для позитрония:

$$v = \frac{n\hbar}{\mu r} \qquad (4)$$

$$\frac{n^2\hbar^2}{\mu r^2} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (5)$$

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{8\pi\varepsilon_0 n^2\hbar^2}{m_e e^2} \qquad (6)$$

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0{}^2 n^2\hbar^2} = -\frac{m_e e^4}{64\pi^2 \varepsilon_0{}^2 n^2\hbar^2} \qquad (7)$$

а) Найдем расстояние между частицами в основном состоянии (n=1), используя соотношение (6):

$$r_1 = \frac{8\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 1{,}04\cdot 10^{-8}\,\text{см} \qquad (8)$$

б) Вычислим ионизационный потенциал и первый потенциал возбуждения, используя (7). Ионизационный потенциал находим по формуле:

$$U_i = \frac{E_i}{e} = \frac{\left|E_{n\to\infty} - E_1\right|}{e} = \frac{m_e e^3}{64\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2} \qquad (9)$$

Подстановка значений в (9) дает: $U_i = 6{,}9\,\text{В}$

Первый потенциал возбуждения есть отношение модуля разности энергий основного состояния с n=1 и первого возбужденного с n=2 к заряду электрона:

$$U_{1\to 2} = \frac{|\Delta E|}{e} = \frac{\left|E_2 - E_1\right|}{e} = \frac{3m_e e^3}{4\cdot 64\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2} \qquad (10)$$

Подстановка значений в (10) с учетом (9) дает: $U_{1\to 2} = 5{,}2\,\text{В}$

в) Найдем постоянную Ридберга, используя выражение для терма и сравнивая его с (7):

$$E_n = \hbar R/n^2 \qquad (11)$$

$$R = \frac{m_e e^4}{64\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar} = 1{,}04\cdot 10^{16}\ \text{с}^{-1} \qquad (12)$$

Длина волны резонансной линии соответствует переходу между основным и первым возбужденным уровнем и определяется соотношением:

$$\lambda_{21} = 2\pi c\hbar/E_{21} \qquad (13)$$

Подставим в (13) изменение энергии из (10) и получим:

$$\lambda_{21} = 2\pi c\hbar\Big/\left(\frac{3m_e e^4}{4\cdot 64\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\right) = \frac{8\cdot 64 c\pi^3\varepsilon_0{}^2\hbar^3}{3m_e e^4} = 0{,}24\,\text{мкм} \qquad (14)$$

Ответ: а) $r_1 = 1{,}04\cdot 10^{-8}$ см;

б) $U_i = 6{,}9$ В, $U_{1\to 2} = 5{,}2$ В;

в) $R = 1{,}04\cdot 10^{16}$ с$^{-1}$, $\lambda_{21} = 0{,}24$ мкм.

Квантовомеханическое описание атома
Справочный материал к тестированию по теме

Многие явления и процессы, имеющие место в атомной физике, не смогли найти объяснения с точки зрения квазиклассической теории Бора. Это связано с тем, что она обладала рядом недостатков, обусловленных ограниченностью ее математического аппарата. Теория Бора не давала возможности рассчитать интенсивности спектральных линий, не могла объяснить дублетный характер спектров щелочных металлов, существование обменных сил, отвечающих за химические связи в молекулах, дифракцию частиц и т.д.

Несмотря на недостатки, теория Бора позволила понять многие новые квантовые закономерности. Она дала возможность качественно интерпретировать и классифицировать большую часть наблюдаемых на тот момент явлений и процессов. Таким образом, теория Бора стала еще одним шагом в атомной физике, повлекшим за собой разработку новой теории и нового математического аппарата – квантовой механики.

Для того чтобы описать физический объект с точки зрения классической механики, необходимо задать его координаты, импульсы (или скорости) и другие величины, которые называют динамическими переменными. В любой фиксированный момент времени они должны иметь определенные числовые значения. При этом главным вопросом в классической механике является вопрос о временной зависимости динамических переменных.

В квантовой механике невозможно определить точное значение всех динамических переменных в фиксированный момент времени. Однако, используя специфику математического аппарата квантовой механики, можно найти среднее значение динамической переменной или с определенной вероятностью значения других динамических переменных.

Для описания объекта с точки зрения **квантовой механики** используют следующие **положения** (постулаты):

1. Состояние квантово-механического объекта, например, атома, описывается волновой функцией ψ;
2. Любой динамической переменной в соответствие ставиться определенный линейный эрмитовый оператор $\hat{A}$;
3. При нахождении числового значения некоторой динамической переменной, которой в соответствие ставиться оператор $\hat{A}$, может быть получен спектр собственных значений этого оператора;
4. Волновая функция ψ, описывающая состояние квантовой системы или объекта, входит в уравнение Шредингера и ее вид зависит от оператора Гамильтона $\hat{H}$.

Под **квантовомеханическим оператором** понимают правило с помощью которого всякой функции из некоторого множества ставится в соответствие некоторая функция из другого или того же множества. **Линейные** операторы являются **эрмитовыми** или **самосопряженными**, то есть их собственные значения являются **действительными числами**. **Оператор Гамильтона** в квантовой механике соответствует функции Гамильтона (полной энергии) в классической механике. Однако вместо классического импульса и координат используются соответствующие им операторы. Все операторы в квантовой физике можно поделить на две группы согласно принципу дополнительности. Операторы одной группы коммутируют друг с другом (например, энергия и импульс), а операторы различных групп – не коммутируют друг с другом (например, координата и импульс, энергия и время). Операторы одной группы дают лишь одностороннее описание системы. Чаще всего работают в координатном или импульсном представлениях. В координатном волновая функция есть функция координат и времени, в импульсном – импульса и энергии.

В квантовой механике используется уравнение, с помощью которого можно описать состояние движения квантового объекта – дифференциальное **уравнение Шредингера.** Оно может быть стационарным и нестационарным. Первое используется, когда состояние движения объекта не меняется с течением времени,

а второе – когда оно изменяется. Под движением квантового объекта в квантовой механике понимают изменение стационарного состояния, а не его перемещения в физическом пространстве как в классической механике. Каждому возможному состоянию системы соответствует некая **волновая функция** ψ, отвечающая уравнению Шредингера. Она должна обладать следующими свойствами:

- непрерывностью;
- однозначностью;
- конечностью;
- гладкостью.

Если подействовать оператором Гамильтона на соответствующую волновую функцию, то можно получить **энергетический спектр**, характеризующий **стационарные состояния квантовой системы**. Численные значения, соответствующие оператору Гамильтона называют его **собственными значениями** $E_{i..}$ Они, как правило, квантованы и дают дискретный спектр значений (например, у атома водорода). Соответствующие этим собственным значениям, **собственные функции оператора Гамильтона (волновые функции** ψ_i**)** определяют **вероятность обнаружения квантовой системы** в состоянии с теми или иными собственными значениями, которая пропорциональна $|\psi_i|^2$.

В квантовой механике отдельно рассматривается задача о движении в центральном поле сил – задача о **ротаторе**. **Ротатор** представляет собой **жесткий диполь** – частицу в центральном поле сил, которая движется на неизменном расстоянии от силового центра $r = a = const$. **Потенциальная энергия ротатора** при этом условии $U(r) = 0$ в гамильтониане задачи. Состояние ротатора описывается **сферической частью волновой функции** $Y_l^m(\theta, \varphi)$, представленной в сферической системе координат. Эта функция зависит от значений **орбитального** и **магнитного квантовых чисел**. Она пропорциональна экспоненциальной функции, связанной с магнитным квантовым числом и присоединенным функциям Лежандра $P_l^m(\cos\theta)$, связанным как с магнитным, так и с орбитальным числом. **Сферическая часть волновой функции** в центральном поле сил является **собственной функцией оператора квадрата момента импульса**, а через l выражается его собственное значение. **Энергетический спектр ротатора** является **дискретным** и зависит от **орбитального квантового числа**. От значения этого числа также зависит **четность сферической функции**.

Водородоподобный атом представляет собой нейтральную систему, состоящую из положительно заряженного ядра и отрицательной частицы, которая совершает орбитальное движение под действием кулоновских сил. Эти силы, как известно, являются центральными и потенциальными. Потенциальная энергия для водородоподобных атомов является функцией от расстояния между ядрами и их электронами (отрицательными частицами) и с его увеличением уменьшается. Если ее подставить в стационарное уравнение Шредингера, то радиальная часть волновой функции $R_n^l(r)$ будет пропорциональной полиному Лагерра $Q_{n-l-1}^{2l+1}(r)$**,** где $k = n - l - 1$ **- радиальное квантовое число**. Энергетический спектр, соответствующий радиальной части волновой функции водородоподобного атома, является дискретным и связан с главным квантовым числом n и является вырожденным. **Кратность вырождения для состояний водородоподобного атома** соответствует n^2. **Кратность вырождения** есть число состояний, соответствующий данному энергетическому уровню. **Уровень с** n**=1** для

водородоподобного атома **является невырожденным.** Соотношение для разрешенных энергий водородоподобного атома, полученное в квантовой механике, полностью совпадает с соотношением для энергий, полученных в рамках квазиклассической теории Бора.

Набор квантовых чисел: главного *n*, орбитального *l*, магнитного *m*, спинового *s* – есть **полный набор**, описывающий состояние квантовой системы – водородоподобного атома. Эти квантовые числа связаны друг с другом определенными правилами, вытекающими из свойств полиномов Лежандра и Лагерра (см приложение 2). Главное квантовое число может быть любым натуральным числом $n \in N$. При этом орбитальное квантовое число является целым неотрицательным и может принимать ряд значений при фиксированном главным квантовом числе $l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$. При заданном *l* магнитное квантовое число может принимать лишь *2l+1* различных значений: $m = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$. **Главное квантовое число** характеризует **энергетическое состояние водородоподобного атома**, а **орбитальное** – состояние движения электрона в атоме **с различными моментами импульса**, которые имеют специальные названия. Если *l=0,* то электрон находится в *s*–состоянии, если *l=1* – в *p*–состоянии и так далее. Магнитное квантовое число *m* определяет **собственное значение проекции момента импульса** на фиксированную ось OZ. При переходе атома из одного стационарного состояния в другое согласно второму постулату Бора меняется набор соответствующих квантовых чисел. Однако и изменение набора этих чисел также подчиняется правилам, которые называются **правилами отбора**. **Правила отбора** определяются при расчете матричного элемента, построенного на волновых функциях начального и конечного состояния атома. Для водородоподобного атома **правилами отбора** разрешены оптические переходы между состояниями: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = \pm 1, 0$ и любое целочисленное Δn.

Атомы щелочных металлов являются элементами первой группы таблицы химических элементов Менделеева. Это означает, что у них имеется только один валентный электрон, за счет которого атом может вступать в химическое взаимодействие. Все остальные электроны *Z-1* (*Z* – порядковый номер элемента) полностью заполняют внутренние уровни (как у благородных газов) и не участвуют во взаимодействиях. Поэтому можно считать, что ядро атома щелочного металла с внутренними электронами образуют атомный остов с зарядом *+e,* в поле которого движется валентный электрон. Следовательно, атом щелочного металла можно рассматривать как водородоподобный атом, но при этом учитывать дополнительное взаимодействие, которое возникает между валентным электроном и внутренними электронами. В связи с этим в потенциальной энергии валентного электрона необходимо учесть поправки, связанные с этим взаимодействием. В этом случае стационарное уравнение Шредингера даст спектр собственных значений энергии для атома щелочного металла. В отличие от атома водорода она будет зависеть от двух квантовых чисел: главного *n* и орбитального *l*. Это означает, что снимается вырождение по орбитальному квантовому числу и энергетические уровни дополнительно расщепляются на подуровни с различными орбитальными числами *l* при фиксированном главном квантовом числе *n*. Число подуровней при этом *n-1*. Расщепления не испытывает только основной уровень с *n=1*. Правила отбора для оптических переходов у атомов щелочных металлов такие же, как у водородоподобных атомов: $\Delta l = \pm 1$, Δn - любое целочисленное число.

Спектры атомов щелочных металлов имеют сложную структуру и содержат **линии трех серий**: главной, диффузной (первая побочная) и резонансной (вторая побочная). Линии **главной серии** образуются за счет оптических переходов валентного электрона из возбужденных *p*–состояний в основное (стационарное) *s*–состояние по правилу: $\omega = ns - mp$, где $n \le m$ - номер энергетического уровня (то есть соответствующие ему главное квантовое число). При $n = m$ имеет место наиболее яркая резонансная линия. Она соответствует переходу между первым возбужденным уровнем и основным для атома щелочного металла. Линии **диффузной серии** достаточно размыты. Они образуются при переходах из d – состояний в первое возбужденное для атома щелочного металла *p*–состояние по правилу: $\omega = np - md$, где $n < m$. Размытость линий обусловлена тем, что для обоих состояний p и d характерно дополнительное расщепление уровней на подуровни. Линии **резкой серии**, как и главной, являются четкими, так как они связаны с нерасщепленным на подуровни *s*–состоянием. Они возникают при оптических переходах валентного электрона из более высоких *s*–состояний в первое возбужденное *p*–состояние и определяются правилом: $\omega = np - ms$, где $n < m$.

Кроме того, экспериментально было обнаружено, что всякая линия каждой серии расщелина на две, то есть является **дублетом**. Это расщепление имеет следующие закономерности:

1) для главной серии расщепление не является постоянным и меняется от линии к линии;

2) для побочных серий расщепление является одинаковым при переходе от линии к линии.

Дублетное расщепление связано с наличием дополнительного квантового числа характеризующего энергию атома щелочного металла и приводящего к возникновению небольшой поправки к основной энергии. Это спиновое квантовое число – спин *s* валентного электрона и связанный с ним собственный магнитный момент μ_s, характеризуемый спиновым магнитным квантовым числом $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Под **спином** в квантовой механике понимают **внутреннюю степень свободы электрона**, механическим аналогом которого мог бы выступать собственный механический момент. Однако попытки истолковать понятие спина классическим образом не увенчались успехом.

Дублетный характер спектров щелочных металлов можно объяснить **спин–орбитальным взаимодействием**. Оно выражается в том, что **спиновый магнитный момент электрона** μ_s взаимодействует с **эффективным магнитным полем ядра** $B_{эфф}$. В системе отсчета связанной с электроном, это эффективное поле создается за счет вращения ядра вокруг электрона. **Спин-орбитальное взаимодействие** приводит к проявлению **тонкой структуры энергетических спектров атомов**. Не расщепляются только s–состояния. Энергия спин-орбитального взаимодействия очень мала и правило отбора при оптических переходах имеет вид $\Delta m_s = 0$, то есть, разрешены переходы без изменения квантового числа m_s.

Спин-орбитальное взаимодействие характерно для любого атома, а не только для щелочных металлов. Следовательно, его энергетические уровни также

испытывают малое расщепление, характерное для проявления тонкой структуры спектра атома. Это означает что линии излучения **мультиплетны**, как и спектры атомов. **Мультиплетность линий излучения** определяется **мультиплетностью термов и правилами отбора** для спина, орбитального и полного моментов при оптических переходах. **Правило мультиплетностей** гласит: термы атомов или ионов с четным числом электронов имеют нечетные мультиплетности; термы атомов или ионов с нечетным числом электронов имеют четные мультиплетности.

Основные соотношения:

Оператор Гамильтона (оператор полной энергии): $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)$,

где $\hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2\Delta$ - оператор квадрата импульса в координатном представлении, при этом $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - оператор Лапласа в ПДСК.

Стационарное уравнение Шредингера: $\hat{H}\psi_i(\vec{r}) = E_i\psi_i(\vec{r})$,

где E_i - собственные значения оператора Гамильтона квантовой системы, $\psi_i(\vec{r})$ - его собственные функции, $\vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z$.

Нестационарное уравнение Шредингера: $\hat{H}\psi_i(\vec{r}) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_i(\vec{r})}{\partial t}$,

Связь собственных значений и функций линейного оператора: $\hat{A}\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$

где λ - собственное значение оператора $\hat{A}$, а $\varphi(x)$ - его собственные функции.

Основное свойство линейных операторов: $\hat{A}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1\hat{A}\psi_1 + a_2\hat{A}\psi_2$,

где ψ_1, ψ_2 - функции, на которые действует оператор, а a_1 и a_2 - числовые коэффициенты при них.

Среднее значение физической величины в случае ненормированной волновой функции: $\langle A\rangle = \frac{\int_V \psi\hat{A}\psi^* dV}{\int_V \psi\psi^* dV}$

Условие нормировки волновой функции: $\int_V \psi\psi^* dV = 1$

Оператор квадрата момента импульса в ССК: $\hat{L}^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\theta,\varphi}$,

где $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ - его собственные значения (l - целые неотрицательные числа).

Оператор проекции момента импульса в ССК: $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$,

где $L_z = \hbar m$ - его собственные значения (m - целые числа).

Уравнение Шредингера в поле центральной силы (общий вид): $\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi(r,\theta,\varphi) = 0$

Оператор Лапласа в ССК: $$\nabla^2 = \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\nabla^2{}_{\theta,\varphi}}{r^2},$$

где оператор сферической части волновой функции:

$$\nabla^2{}_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Волновая функция в центральном поле сил может быть представлена в виде произведения радиальной $R(r)$ и сферической $Y(\theta,\varphi)$ частей:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi).$$

Уравнение для радиальной части волновой функции: $$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \left(\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(r)] - \frac{\lambda}{r^2}\right)R(r) = 0.$$

Вид радиальной части волновой функции зависит от потенциальной энергии $U(r)$ в центральном поле сил для конкретной задачи.

Уравнение для сферической части волновой функции: $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + \lambda Y = 0,$$

где $\lambda = l(l+1)$ - постоянное число, связанное с орбитальным моментом.

Сферическая часть для ротатора и водородоподобного атома: $$Y_l^m(\theta,\varphi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta),$$

где $P_l^m(\cos\theta)$ - присоединенная функция Лежандра (см. приложение 2)

Набор частот, излучаемых ротатором при переходах между его уровнями, разрешенными правилами отбора:

$$\omega_{l,l\pm1} = \frac{E_l - E_{l\pm1}}{\hbar} = \frac{\hbar}{2J}\begin{cases} l(l+1) - l(l-1) \\ l(l+1) - (l+1)(l+2) \end{cases} = \frac{\hbar}{J}\begin{cases} l, & (l' = l-1) \\ -(l+1), & (l' = l+1) \end{cases},$$

где $J = ma^2$ - момент инерции ротатора.

Радиальная часть волновой функции водородоподобного атома в поле центральных кулоновских сил: $$R_{nl}(\rho) = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{4}{(n-l-1)!(n+1)!}}e^{-\rho/2}\rho^l Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho),$$

где $Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ - полиномы Лагерра (см. приложение 2); $a_0 = \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$ - радиус первой боровской орбиты в атоме водорода; $\rho = \dfrac{2Zr}{na_0}$; Z – порядковый номер элемента водородоподобного атома.

Энергия водородоподобного атома в квантовой механике: $$E_n = -\frac{Z^2e^4m}{32\cdot\pi^2\varepsilon_0^2n^2\hbar^2}$$

Потенциальная энергия атомов

щелочных металлов: $$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - C_1\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon r^2} - C_2\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon r^3} + \ldots,$$

где второе, третье и последующие слагаемые являются поправками, учитывающими взаимодействие валентного электрона с внутренними, входящими в состав атомного остова.

Энергия атомов щелочных металлов: $$E_{n,l} = -\frac{Z^2 e^4 m}{32\cdot\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2\left[n+\sigma(l)\right]^2},$$

где $\sigma(l) = -C_1\dfrac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2\left(l+\dfrac{1}{2}\right)}$; C_1 - постоянная, имеющая размерность длины.

Собственные значения квадрата собственного момента импульса – спина: $$L_S{}^2 = \hbar^2 s(s+1),$$

где s – спиновое квантовое число.

Собственные значения проекции собственного момента импульса электрона: $$L_{S\,z} = \hbar m_S,$$

где $m_S = \pm\dfrac{1}{2}$ - магнитное квантовое число, связанное со спином.

Связь между собственными магнитным и механическим моментами для электрона: $$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m}\vec{L}_S.$$

Проекция собственного магнитного момента: $$\mu_{S\,z} = \pm\frac{e\hbar}{2m}.$$

Поправка к энергии атома щелочного металла, связанная со спин орбитальным взаимодействием: $$E' = \left(\vec{\mu}_S, \vec{B}_{эф}\right) = \pm\frac{e\hbar B_{эф}}{2m},$$

где $B_{эф}$ - эффективное магнитное поле, созданное атомным остовом в системе отсчета, связанной с электроном.

Варианты тестов промежуточного контроля по теме

ТЕСТ№1

1. Как в квантовой механике можно описать состояние квантово-механического объекта, например, атома?
2. Собственные значения линейного самосопряженного оператора являются _____?
3. Что понимают под движением квантового объекта в квантовой механике?
4. Когда используется стационарное уравнение Шредингера?
5. Что характеризует главное квантовое число?
6. Запишите выражение для радиального квантового числа.
7. Оператор Лапласа в сферической системе координат записывается как _____.
8. Среднее значение физической величины записывается в виде: _____.
9. Энергия водородоподобного атома в квантовой механике равна _____.
10. Собственные значения оператора квадрата момента импульса в ССК равны ___.

ТЕСТ№2

1. Любой динамической переменной в соответствие ставится определенный _____ $\hat{A}$.
2. Стационарное уравнение Шредингера имеет вид: _____.
3. Какие значения, соответствующие оператору Гамильтона, называют его собственными значениями E_i ?
4. Что представляет собой ротатор?
5. Какие уровни называют вырожденными?
6. Какое взаимодействие приводит к проявлению тонкой структуры энергетических спектров атомов?
7. При заданном орбитальном числе l магнитное квантовое число может принимать лишь ____ различных значений.
8. Основное свойство линейных операторов определяется равенством: _____.
9. Собственные значения квадрата собственного момента импульса определяются выражением: _____.
10. Волновая функция в центральном поле сил может быть представлена в виде _____.

ТЕСТ№3

1. В результате чего может быть получен спектр собственных значений квантово-механического оператора?
2. Как называют оператор, который ставится в соответствие полной энергии частицы?
3. Что характеризуют собственные функции оператора Гамильтона (волновые функции ψ_i)?
4. Каков энергетический спектр ротатора?
5. Набор каких квантовых чисел называют полным набором?
6. Внутреннюю степень свободы электрона, механическим аналогом которого мог бы выступать собственный механический момент, характеризуют понятием _____.
7. Оператор квадрата импульса в координатном представлении имеет вид: _____.
8. Условие нормировки волновой функции имеет вид: _____.
9. Собственные значения проекции собственного момента импульса электрона _____.
10. Потенциальная энергия атомов щелочных металлов имеет вид: _____.

ТЕСТ№4

1. Правило с помощью которого всякой функции из некоторого множества ставится в соответствие некоторая функция из другого или того же множества в квантовой механике называют _____.
2. Оператор Гамильтона имеет вид:_____.
3. Какими свойствами должна обладать волновая функция, являющаяся решением стационарного уравнения Шредингера?
4. Какими квантовыми числами определяется энергетический спектр ротатора?
5. Какой уровень для водородоподобного атома является невырожденным?
6. Что характеризует орбитальное квантовое число?
7. Нестационарное уравнение Шредингера представляет собой выражение: ____.
8. Радиус первой боровской орбиты в атоме водорода равен _____.

9. Связь между собственными магнитным и механическим моментами для электрона записывается как _____.
10. Линии каких серий содержат спектры атомов щелочных металлов?

Примеры заданий с решениями по теме

Задание №1. Найти собственные функции и собственные значения оператора: $-i\dfrac{d}{dx}$, если $\varphi(x)=\varphi(x+a)$, где a - постоянная.

Решение: Воспользуемся соотношением, устанавливающим связь между собственными значениями и функциями линейного оператора:

$$\hat{A}\varphi(x)=\lambda\varphi(x) \qquad (1)$$

По условию: $\hat{A}=-i\dfrac{d}{dx}$, следовательно:

$$-i\frac{d}{dx}\varphi(x)=\lambda\varphi(x) \qquad (2)$$

Соотношение (2) является однородным уравнение первого порядка с разделяющимися переменными:

$$\frac{d\varphi(x)}{\varphi(x)}=i\lambda dx \qquad (3)$$

$$\int\frac{d\varphi(x)}{\varphi(x)}=i\lambda\int dx \qquad (4)$$

$$\ln(\varphi(x))=i\lambda x \qquad (5)$$

$$\varphi(x)=Ce^{i\lambda x} \qquad (6)$$

Соотношение (6) является собственной функцией для заданного оператора.

Удовлетворим условию периодичности $\varphi(x)=\varphi(x+a)$ для нахождения собственного значения λ:

$$\varphi(x+a)=Ce^{i\lambda(x+a)} \qquad (7)$$

$$Ce^{i\lambda(x+a)}=Ce^{i\lambda x} \qquad (8)$$

$$e^{i\lambda a}=\cos\lambda a+i\sin\lambda a=1,\Rightarrow\cos\lambda a=1$$

$$\lambda a=2\pi n\text{, где } n=0,\pm1,\pm2... \qquad (9)$$

$$\lambda=\frac{2\pi n}{a} \qquad (10)$$

Соотношение (10) определяет собственные значения заданного оператора.

Ответ: $\varphi(x)=Ce^{i\lambda x}$, $\lambda=\dfrac{2\pi n}{a}$.

Задание №2. Найти среднюю кинетическую энергию частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками ($0<x<l$), если частица находится в состоянии:
$\varphi(x)=Ax(l-x)$.

Решение:

Среднее значение операторной величины в общем случае для ненормированной собственной функции определяется соотношением:

$$\langle A \rangle = \frac{\int\limits_V \psi \hat{A} \psi^* dV}{\int\limits_V \psi \psi^* dV} \qquad (1)$$

По условию задача является одномерной с ограниченным движением по оси *OX*, следовательно, вместо интегрирования по объему в (1) будет интеграл по x, а оператор кинетической энергии:

$$\hat{A} = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \qquad (2)$$

Подставим (2) и волновую функцию в (1) и учтем пределы интегрирования заданные в условии задачи:

$$\langle T \rangle = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_0^l Ax(l-x)\frac{d^2}{dx^2}[Ax(l-x)]dx}{\int\limits_0^l [Ax(l-x)]^2 dx} \qquad (3)$$

Проведем интегрирование в (3):

$$\int\limits_0^l Ax(l-x)\frac{d^2}{dx^2}[Ax(l-x)]dx = A^2\int\limits_0^l x(l-x)[-2]dx = -A^2\frac{l^3}{3} \qquad (4)$$

$$\int\limits_0^l [Ax(l-x)]^2 dx = A^2\int\limits_0^l x^2\left(l^2 - 2lx + x^2\right)dx = A^2\frac{l^5}{30} \qquad (5)$$

Подставим (4) и (5) в соотношение (3) и найдем искомое значение средней энергии:

$$\langle T \rangle = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-A^2\frac{l^3}{3}\right)}{A^2\frac{l^5}{30}} = \frac{5\hbar^2}{ml^2} \qquad (6)$$

Ответ: $\langle T \rangle = \frac{5\hbar^2}{ml^2}$

Задание №3. Электрон в атоме водорода находится в стационарном состоянии, описываемом сферически – симметричной волновой функцией $\varphi(r) = A(1+ar)e^{\alpha r}$, где A, a, α - постоянные. Найти постоянные a, α и энергию электрона, а также нормировочный коэффициент A.

Решение:

Воспользуемся стационарным уравнением Шредингера:

$$\hat{H}\psi_i(r) = E_i\psi_i(r) \qquad (1),$$

где $\hat{H}$ - оператор Гамильтона (оператор полной энергии), который имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) \qquad (2),$$

где $\hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2\Delta$ - оператор квадрата импульса в координатном представлении.

При этом оператор Лапласа в ССК:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\nabla^2{}_{\theta,\varphi}}{r^2} \qquad (3)$$

Так как по условию волновая функция является сферически симметричной, то она не зависит от углов, поэтому в (3) действие второго слагаемого в уравнении Шредингера даст нуль.

Между электроном и ядром в атоме водорода устанавливается кулоновское взаимодействие, то есть потенциальная энергия равна:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (4)$$

Таким образом (1) с учетом условия задачи и соотношений (2), (3) и (4) примет вид:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)(1+ar)e^{\alpha r} + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right)(1+ar)e^{\alpha r} = 0 \quad (5)$$

Найдем производные в выражении (5):

$$\frac{\partial}{\partial r}(1+ar)e^{\alpha r} = e^{\alpha r}(a+\alpha+a\alpha r) \qquad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2 e^{\alpha r}(a+\alpha+a\alpha r)\right] = e^{\alpha r}\left(2r(a+\alpha) + 3r^2 a\alpha + \alpha(a+\alpha)r^2 + \alpha^2 a r^3\right) \qquad (7)$$

Подставим (7) в (5) и сравним коэффициенты при одинаковых степенях:

$$\left(2r(a+\alpha) + 3r^2 a\alpha + \alpha(a+\alpha)r^2 + \alpha^2 a r^3\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + E\right)(1+ar) = 0 \qquad (8)$$

В результате получим уравнения:

$$a + \alpha + \frac{m}{\hbar^2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 0,\ a = -\alpha - \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2} \qquad (9)$$

$$4a\alpha + \alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{mae^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2} = 0 \qquad (10)$$

$$\alpha^2 a + \frac{2maE}{\hbar^2} = 0 \qquad (11)$$

Решение уравнений (9) – (11) дает следующий результат:

$$a = \alpha = -\frac{me^2}{8\pi\varepsilon_0\hbar^2} \qquad (12)$$

$$E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = -\frac{me^4}{64\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \qquad (13)$$

Из (13) видно, что значение энергии электрона соответствует энергии атома водорода при n=2.

Для того чтобы найти A воспользуемся условием нормировки:

$$\int_V \psi\psi^* dV = 1 \qquad (14)$$

Интегрирование по объему будем проводить в сферических координатах:

$$dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \qquad (15)$$

Подставим в (14) соотношение (15) и значение волновых функций:

$$A^2 \int_o^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^2 (1+ar)^2 e^{2\alpha r} dr = 1 \qquad (16)$$

$$A^2 4\pi \left[\int_0^{\infty} r^2 e^{2\alpha r} dr + \int_0^{\infty} 2ar^3 e^{2\alpha r} dr + \int_0^{\infty} a^2 r^4 e^{2\alpha r} dr \right] = 1 \qquad (17)$$

Значения интегралов в (17) табличные

$$A^2 4\pi \left[-\frac{1}{4a^3} \right] = 1, \Rightarrow A = \sqrt{\left(-\frac{a^3}{\pi} \right)} \qquad (18)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{me^2}{8\pi\varepsilon_0\hbar^2} \right)^{3/2} \qquad (19)$$

Ответ: $a = \alpha = -\dfrac{me^2}{8\pi\varepsilon_0\hbar^2}$, $E = -\dfrac{me^4}{64\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}$, $A = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\dfrac{me^2}{8\pi\varepsilon_0\hbar^2} \right)^{3/2}$

Векторная и оболочечная модели атомов
Справочный материал к тестированию по теме

Векторная и оболочечная модели атома являются квантовомеханическим. Эти модели позволяют описать состояние любого атома с помощью полного набора квантовых чисел: главного *n*, орбитального *l*, магнитного *m*, спинового магнитного m_S.

Векторная модель атома строится на том факте, что состояние каждого атома связано с наличием у электронов и ядер механических и магнитных моментов. В квантовой механике этим моментам соответствуют определенные квантовые числа: орбитальное, спиновое и соответствующие им магнитные числа. Механический момент атома связан с орбитальным и спиновым движением ядра и электронов. Электрон и ядро вследствие своего движения создают **молекулярные круговые токи,** которым соответствуют определенные магнитные моменты. Таким образом, **магнитный момент атома** выражается через его механический момент. **Полный магнитный момент атома** в квантовой механике можно представить как в классической механике. Он равен векторной сумме магнитного момента орбитального движения электронов, магнитного момента их спинового движения и магнитного момента спинового движения ядра (из-за малости им пренебрегают).

В зависимости от ориентации магнитных моментов атомов вещества и значения полного магнитного момента выделяют три типа **магнетиков**: диамагнетики, парамагнетики, ферромагнетики.

Соотношение между магнитными и соответствующими им механическими моментами в квантовой и классической теории совпадают, что и доказывает их

достоверность. Вывод такого соотношения в квантовой механике также основан на определении плотности тока, созданного электроном в атоме. Однако эта плотность выражается через волновые функции $\psi(r,\theta,\varphi)$, описывающие состояние этого электрона в атоме.

При построении векторной модели атома необходимо учитывать, что проекции моментов импульса не коммутируют друг с другом, то есть их нельзя определить одновременно. Однако коммутируют квадрат момента импульса и его проекция на некоторое фиксированное направление, которое связано с выбором оси OZ. Это означает, что модульное значение вектора момента импульса и его проекция на ось OZ известны, а проекции на остальные оси строго не определены. То есть орбитальный момент импульса можно представить в виде прецессирующего вектора относительно оси OZ. Квадрат момента импульса связан с орбитальным квантовым числом, а его проекция с магнитным. Принимая во внимание связь между орбитальным и магнитным числом можно сделать вывод, что при фиксированном орбитальном числе возможны $2l+1$ способа ориентации механического момента относительно данного направления, так как магнитное число может при этом иметь $2l+1$ значение. Таким образом, механический момент оказывается **пространственно квантованным**, то есть его проекции на фиксированное направление образуют ряд дискретных значений. Максимальное абсолютное значение проекции возможно при $m=l$, то есть угол между вектором и проекцией момента импульса никогда не принимает значения 0 или π. Этот факт указывает на невозможность определения трех проекций момента одновременно. Необходимо отметить также, что в s – состоянии момент импульса равен нулю, то есть движение является радиальным. Все приведенные выше рассуждения выполняются и для собственного момента импульса – спина.

Отношение модуля магнитного момента к модулю механического называют гиромагнитным числом в единицах $e/2m$. Таким образом, гиромагнитное отношение является безразмерной величиной. Гиромагнитное отношение для орбитальных механического и магнитного моментов равен 1, для спина – 2.

Полный механический момент $\vec{L}_j$ каждого **отдельного электрона** атома равен векторной сумме момента импульса $\vec{L}_l$, связанного с орбитальным движением и спинового момента $\vec{L}_s$. В квантовой механике суммирование орбитального и спинового момента проводится с учетом пространственного квантования. Полный механический момент сохраняет свое направление в пространстве, а $\vec{L}_l$ и $\vec{L}_s$ прецессируют относительно него. **Полный магнитный момент** электрона $\vec{\mu}_j$ также выражается через векторную сумму магнитного момента $\vec{\mu}_l$, связанного с орбитальным движением и спинового магнитного момента $\vec{\mu}_s$. Так как гиромагнитные отношения для спинового и орбитального моментов отличаются (у спинового в два раза больше), полные механический и магнитный моменты не лежат на одной прямой. Вследствие закона сохранения момента импульса полный механический момент сохраняет свое направление в пространстве, а полный магнитный момент прецессирует относительно этого направления.

У многоэлектронных атомов полные механические и магнитные моменты также определяются через векторное сложение с учетом пространственного

квантования. Однако возможны различные способы образования полного момента таких атомов. Наиболее распространёнными являются *L-S* – связь и *j-j* – связь, но возможны и промежуточные типы связи.

Правила сложения орбитальных моментов.

1. Число способов, которыми могут складываться два орбитальных момента, равно числу возможных значений результирующего орбитального момента $2\min(l_1, l_2)+1$.
2. Полное число различных ориентаций полного орбитального момента $\vec{L}_L$ относительно избранного направления равно $2L+1$

Правила сложения спиновых моментов.

1. Квантовое число полного спина *S* может принимать следующие значения:
$$S = \begin{cases} \frac{1}{2}N, \frac{1}{2}N-1, \ldots, 0, & (\text{при } N \text{ четном}) \\ \frac{1}{2}N, \frac{1}{2}N-1, \ldots, \frac{1}{2}, & (\text{при } N \text{ нечетном}) \end{cases}$$
2. Полное число различных ориентаций полного спинового момента $\vec{L}_S$ относительно избранного направления равно $2S+1$

***j-j* – связь** реализуется когда энергия взаимодействия спина электрона с его орбитальным моментом больше, чем энергия взаимодействия орбитальных и спиновых моментов данного электрона с соответствующими моментами других электронов атома. В этом случае находят полный момент $\vec{L}_j$ каждого электрона атома в соответствии с правилами сложения, а затем их векторно складывают с учетом пространственного квантования и находят полный механический момент атома $\vec{L}_J$.

***L-S* – связь** реализуется тогда, когда энергия взаимодействия спина электрона с его орбитальным моментом меньше, чем энергия взаимодействия между орбитальными и спиновыми моментами всех электронов атома. В этом случае находят полный орбитальный $\vec{L}_L$ и полный спиновый $\vec{L}_S$ моменты атома, а затем их векторно складывают с учетом пространственного квантования и находят полный механический момент атома $\vec{L}_J$. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что чаще всего реализуется ***L-S* – связь**. В теории строения атомов эта связь играет главную роль.

В случае *L-S* – связи число способов, с помощью которых можно получит полный момент атома при заданном квантовом числе *L* полного орбитального момента атома и числе *S* полного спина атома равно $2\min(L,S)+1$. Чаще всего ориентируются по спиновому числу, которое в основном меньше орбитального. Число способов ориентации полного момента атома относительно произвольного направления равно $2J+1$.

Гиромагнитное отношение для полного механического и магнитного моментов называется **множителем Ланде**. Он зависит от квантовых чисел *L, S* и *J*, характеризующих атом. Множитель Ланде $g_J=1$ при условии $S=0, J=L$ и $g_J=2$ при условии $L=0, J=S$. В общем случае он является рациональной дробью.

Классификация состояний атома связана с квантовыми числами полного спина S, орбитального момента L и полного момента атома J. Орбитальный момент атома обозначается по аналогии с одноэлектронными состояниями

соответствующими буквами. Схема обозначения состояния атома имеет вид: ${}^{2S+1}L_J$. Символ L соответствует орбитальному состоянию атома. В верхнем левом углу указана мультиплетность термов атома. В нижнем углу справа дается полный момент атома.

Векторная модель позволила объяснить эффекты, возникающие при помещении атомов во внешние магнитные поля (Зеемана, Пашена – Бака, Барнетта, Эйнштейна - де Гааза и другие), мультиплетность термов и линий излучения.

Оболочечная модель дает возможность описать состояние атома, распределив все его электроны по определенным оболочкам (уровням) и соответствующим им подуровням в соответствии с определенными квантовомеханическими принципами. Такое распределение электронов по состояниям называют **электронной конфигурацией** атома.

Для заполнения электронных оболочек атома в первом приближении (оно не учитывает взаимодействие электронов атома друг с другом) необходимо учитывать два принципа:

1. **Принцип минимума энергии**: при данном общем числе электронов в атоме осуществляется состояние с минимальной энергией.
2. **Принцип Паули**: в атоме может быть только один электрон с данным набором квантовых чисел: n, l, m, m_S.

Совокупность электронов, характеризуемых одним и тем же главным квантовым числом, образует **оболочку атома.** Оболочки соответствуют значениям главных квантовых чисел и имеют следующие обозначения:

Главное квантовое число *n*	1 2 3 4 5
Оболочка (ее обозначение)	K L M N O

Совокупность электронов с одним и тем же орбитальным числом называют **подгруппой**. Каждому орбитальному числу соответствует определенное орбитальное состояние:

Орбитальное квантовое число *l*	0 1 2 3 4
Оболочка (ее обозначение)	s p d f g

Число электронов с фиксированными главным и орбитальным числами равно $2\cdot(2l+1)$, где $2l+1$ - число возможных значений магнитного квантового числа *m*, а два – есть число возможных значений проекций спина $m_S = \pm\frac{1}{2}$.

Максимальное число электронов при фиксированном числе n равно $2n^2$.

Идеальная схема заполнения оболочек основывается на следующем **принципе**: Каждый вновь присоединяющийся электрон помещается в состояние с наименьшими квантовыми числами *n* и *l* в соответствии с принципом Паули.

Ниже приведена идеальная схема заполнения оболочек:

Оболочка	*n*	Максимальное число электронов в состояниях					Всего электронов в оболочке
		s	p	d	f	g	
K	1	2					2
L	2	2	6				8
M	3	2	6	10			18
N	4	2	6	10	14		32
J	5	2	6	10	14	18	50

Заполнение оболочки приводит к образованию устойчивой электронной конфигурации соответствующей благородным газам. После этого начинает заполняться следующая оболочка, и первым элементом при таком заполнении является щелочной металл.

Последовательность заполнения электронных состояний в пределах подгруппы определяется **правилом Хунда**: сначала заполняются состояния с различными значениями магнитного квантового числа при одинаковом значении спинового числа $m_S = \frac{1}{2}$. После заполнения всех $2l+1$ состояний по магнитному квантовому числу, начинается заполнение электронами с противоположной проекцией спина $m_S = -\frac{1}{2}$.

Реальная схема заполнения электронных оболочек отличается от идеальной тем, что в ней учитывается взаимодействие электронов атома между собой и отклонение электростатического поля в атоме от кулоновского.

Электронная конфигурация обычно записывается следующим образом. Сначала указывается главное квантовое число (номер оболочки), затем орбитальное число (состояние) и в виде степени у этого состояния число электронов в нем. Пример: $1s^2 2s^2 2p^2$ - электронная конфигурация атома углерода.

До аргона включительно выполняется идеальная схема заполнения электронных конфигураций. Далее, начиная с четвертого периода, эта схема нарушается по причинам, указанным выше. Так в четвертом периоде у калия ^{19}K наиболее энергетически выгодным оказывается заполнение *4s*, а не *3d* состояний. Заполнение *3d* состояний происходит после кальция ^{20}Ca. Причем это заполнение не является последовательным, так как в некоторых случаях энергетически выгодным может оказаться переброс электронов между состояниями *4s* и *3d*. Те же закономерности наблюдаются при заполнении состояний элементов пятой, шестой группы и так далее.

Трансурановыми элементами называют нестабильные элементы седьмого периода, полученные искусственно. Большое число нуклонов в ядрах этих элементов приводит к тому, что кулоновские силы отталкивания не могут быть уравновешены ядерными силами, которые гораздо больше по интенсивности, что приводит его распаду. Трансурановые элементы относятся к ряду актинидов. Ядра этих элементов подвержены спонтанному делению. Из актинидов только торий, протактиний и уран существуют устойчиво в природе. Их времена распада достаточно велики.

Каждый **элемент** обладает характерным для него **рентгеновским линейчатым спектром**, который называют **характеристическим**. Рентгеновские спектры атомов отличаются от оптических:

1. частотой излучения (она в тысячи раз больше);
2. структурой (она одинакова у различных элементов);
3. рентгеновские спектры поглощения не похожи на рентгеновские спектры испускания (состоят из нескольких полос с резким длинноволновым краем).

Рентгеновское излучение образуется за счет переходов внутренних электронов атома в более низкие состояния, на которых отсутствует электрон

(например, он был выбит из внутренней оболочки при внутреннем фотоэффекте или фотоионизации). При этом излучается квант света, энергия которого соответствует разности энергетических уровней, и в которой учтены эффекты экранировки ядра внутренними электронами.

Так как внутренние оболочки атома имеют одинаковое строение, то поправка на экранировку для каждой оболочки должна быть одинаковой. Следовательно, все тяжелые атомы должны иметь одинаково построенные рентгеновские спектры, лишь у более тяжелых спектр смещается в сторону больших частот, то есть внутренние оболочки атомов имеют одинаковое строение. Этот факт подтверждает правильность тех выводов, которые следуют из оболочечной модели и применяются для объяснения заполнения электронных оболочек у элементов периодической системы Менделеева.

Для рентгеновских спектров выполняется экспериментальный **закон Мозли**: Корни квадратные из рентгеновских термов зависят линейно от зарядового числа Z (порядкового номера) элементов.

Закономерности рентгеновских спектров находятся в хорошем согласии с представлением об одинаковости строения внутренних оболочек атома. Только внешние оболочки атомов периодически повторяются, что приводить к повторению их химических свойств.

Основные соотношения:

Связь между магнитным и орбитальным механическим моментом электрона в квантовой механике: $\mu_l = -\frac{e}{2m} L_l = \mu_Б \sqrt{l(l+1)}$.

где $\mu_Б$ - магнетон Бора

Связь между проекциями моментов электрона на фиксированное направление в квантовой механике: $\mu_{lZ} = -\frac{e}{2m} L_{lZ} = \mu_Б m$.

Угол между L_l и фиксированным направлением OZ: $\cos(L_{lZ}, L_l) = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$.

Гиромагнитное отношение для орбитальных моментов: $\frac{\mu_l}{L_l} = \frac{e}{2m} g_l, \quad g_l = 1,$

Гиромагнитное отношение для спинов: $\frac{\mu_S}{L_S} = \frac{e}{2m} g_S, \quad g_S = 2,$

где g_l и g_S - гиромагнитные отношения в единицах $\frac{e}{2m}$.

Полный механический момент электрона (правило сложения): $\vec{L}_j = \vec{L}_l + \vec{L}_S$

Собственные значения модуля полного момента: $L_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}$,

где $j = l \pm 1/2$ - квантовое число полного момента. При фиксированном орбитальном числе l оно может принимать лишь два значения, кроме s – состояния. В s – состоянии j имеет лишь одно значение $j = 1/2$.

Собственные значения проекции полного момента: $L_{jZ} = \hbar m_j$

где $m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$ - магнитное квантовое число полного момента.

Угол между орбитальным и спиновым моментами: $\cos\left(\vec{L}_l, \vec{L}_S\right) = \dfrac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)}\sqrt{s(s+1)}}$,

из соотношения следует, что при фиксированном l возможны два угла, так как j имеет два значения.

Полный магнитный момент электрона (правило сложения): $\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_S$.

Правило сложения орбитальных моментов: $\vec{L}_L = \vec{L}_{l_1} + \vec{L}_{l_2}$.

Собственное значение результирующего момента: $L_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}$,

где $L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \ldots, |l_1 - l_2|$ - квантовое число, характеризующее результирующий орбитальный момент.

Число способов сложения орбитальных моментов: $N_{l_1,l_2} = 2\min(l_1, l_2) + 1$.

Собственное значение проекции результирующего орбитального момента на фиксированное направление OZ: $L_{LZ} = \hbar m_L$,

где $m_L = -L, -L+1, \ldots, L-1, L$ - магнитное квантовое число результирующего орбитального момента.

Число способов ориентации результирующего орбитального момента относительного фиксированного направления OZ: $N_L = 2L + 1$.

Полный спиновый момент всех электронов: $\vec{L}_S = \sum_{i=1}^{N} \vec{L}_{Si}$.

где N - число электронов в атоме.

Собственное значение полного спина: $L_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}$,

где $S = \begin{cases} \frac{1}{2}N, \frac{1}{2}N - 1, \ldots, 0, & (\text{при } N \text{ четном}) \\ \frac{1}{2}N, \frac{1}{2}N - 1, \ldots, \frac{1}{2}, & (\text{при } N \text{ нечетном}) \end{cases}$ - квантовое число полного спина.

Собственное значение проекции полного спина на фиксированное направление OZ: $L_{SZ} = \hbar m_S$,

где $m_S = -S, -S+1, \ldots, S-1, S$ - магнитное квантовое число полного спина.

Число возможных ориентаций полного спина: $N_S = 2S + 1$.

Полный момент атома при L-S связи: $\vec{L}_J = \vec{L}_L + \vec{L}_S$

Собственное значение полного момента атома: $L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$,

где $J = L + S, L + S - 1, \ldots, |L - S|$ - квантовое число, соответствующее полному моменту атома при L-S связи.

Число способов, которыми может быть образован полный момент атома: $N_{LS} = 2\min(L, S) + 1$.

Проекция полного момента атома на ось OZ: $L_{JZ} = \hbar m_J$,

где $m_J = -J, -J+1, \ldots, J-1, J$ - магнитное квантовое число полного момента атома.

Число способов ориентации полного момента атома относительно фиксированного направления: $N_J = 2J + 1$.

Полный магнитный момент атома: $\vec{\mu}_{полн} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S$,

где $\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L}_L$ и $\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m}\vec{L}_S$ - связь между полными механическими и магнитными моментами атома.

Полный магнитный момент атома: $\vec{\mu}_{полн} = \vec{\mu}_J + \vec{\mu}_\perp$,

где $\vec{\mu}_J$ - составляющая полного магнитного момента, совпадающая с полным механическим моментом атома, $\vec{\mu}_\perp$ - перпендикулярная составляющая, которая очень мала и ей можно пренебречь.

Собственное значение полного магнитного момента атома: $\mu_J = \mu_Б g_J \sqrt{J(J+1)}$.

Множитель Ланде: $g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$.

Энергия электрона в кулоновском поле ядра с зарядом *Ze*: $E_n = -\frac{R\hbar}{n^2}Z^2$

Энергия электрона на внутренней оболочке атома: $E_n = -\frac{R\hbar}{n^2}(Z - a_n)^2$,

где a_n - учитывает экранировку поля ядра внутренними электронами и возмущения со стороны других электронов.

Общий вид рентгеновского терма: $T(n) = \frac{R}{n^2}(Z - a_n)^2$.

Закон Мозли: $\sqrt{\frac{T}{R}} = \frac{1}{n}(Z - a_n)$.

Варианты тестов промежуточного контроля по теме

ТЕСТ№1

1. Что позволяют описать векторная и оболочечная модели атомов?
2. Гиромагнитное число–это _____.
3. Полное число различных ориентаций полного орбитального момента $\vec{L}_L$ относительно избранного направления равно _____.
4. На чем основывается идеальная схема заполнения оболочек?
5. Какие элементы называются трансурановыми?
6. Связь между проекциями моментов электрона на фиксированное направление в квантовой механике имеет вид: _____.
7. Какие значения принимает спиновое магнитное квантовое число?
8. Энергия электрона в кулоновском поле ядра с зарядом *Ze* определяется выражением _____.
9. $T(n) = \frac{R}{n^2}(Z - a_n)^2$ – общий вид _____ терма.
10. Заполните пропуски в таблице

Орбитальное квантовое число *l*	0	1	2	3	4
Оболочка (ее обозначение)		p		f	

ТЕСТ№2

1. Электрон и ядро вследствие своего движения создают _____ токи.
2. Чему равен полный механический момент $\vec{L}_j$ каждого отдельного электрона атома?
3. Гиромагнитное отношение для полного механического и магнитного моментов называется _____.
4. Совокупность электронов, характеризуемых одним и тем же главным квантовым числом, образует _____ атома.
5. Если корни квадратные из рентгеновских термов зависят линейно от зарядового числа Z элементов, то это закон _____.
6. $\frac{\mu_l}{L_l} = \frac{e}{2m} g_l, \quad g_l = 1$ – это гиромагнитное отношение для _____.
7. $L_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}$ – значение полного _____.
8. Формула, соответствующая закону Мозли, имеет вид: _____.
9. $N_{l_1,l_2} = 2\min(l_1, l_2) + 1$ – это число способов сложения _____моментов.
10. Полный спиновый момент всех электронов представляет собой сумму вида: _____.

ТЕСТ№3

1. Как можно представить полный магнитный момент атома в квантовой механике?
2. Векторная сумма магнитного момента $\vec{\mu}_l$, связанного с орбитальным движением и спинового магнитного момента представляет собой _____.
3. В чем заключается принцип минимума энергии?
4. Сформулируйте правило Хунда.
5. Чем рентгеновские спектры атомов отличаются от оптических?
6. $\frac{\mu_S}{L_S} = \frac{e}{2m} g_S, \quad g_S = 2$ – это гиромагнитное отношение для _____.
7. Собственное значение проекции результирующего орбитального момента на фиксированное направление OZ есть _____.
8. Число способов ориентации полного момента атома относительно фиксированного направления определяется следующим выражением _____.
9. Угол между L_l и фиксированным направлением OZ определяется как _____.
10. Приведите примеры актинидов, которые существуют устойчиво в природе.

ТЕСТ№4

1. Какие виды магнетиков вы знаете?
2. Число способов, которыми могут складываться два орбитальных момента, равно числу возможных значений _____ момента.
3. Какие значения может принимать квантовое число полного спина *S*?
4. В чем заключается принцип Паули?
5. Какие спектры называют характеристическими?

6. Связь между орбитальными магнитным и механическим моментами электрона в квантовой механике имеет вид: _____.
7. Собственные значения модуля полного момента определяются равенством ____.
8. $\vec{L}_J = \vec{L}_L + \vec{L}_S$ – полный момент атомов при _____ связи.
9. Собственное значение полного магнитного момента атома имеет вид: _____.
10. Какой вид имеет схема обозначения состояния атома?

Примеры заданий с решениями по теме

Задание №1. Найти угол между спиновым и полным механическими моментами в векторной модели атома:

1) находящегося в состоянии ^3D с максимально возможным значением полного механического момента;

2) содержащего, кроме заполненных подоболочек, три электрона (p, d и f) и имеющего максимально возможный для этой конфигурации полный механический момент.

Решение:

Согласно векторной модели атома его механические и магнитные моменты можно представить в виде векторов и работать с ними в таком представлении, учитывая квантованность этих величин. Как известно, полный момент атома есть геометрическая сумма спинового и орбитального механических моментов:

$$\vec{L}_J = \vec{L}_L + \vec{L}_S \qquad (1)$$

Следовательно, для нахождения угла между указанными моментами необходимо использовать теорему косинусов:

$$\cos\theta = \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{S(S+1)}} \qquad (2)$$

В первом пункте задачи дано состояние атома ^3D. Если сравнить его со схемой обозначения таких состояний, то верхний индекс соответствует $2 \cdot S + 1 = 3$ ($S = 1$), а $L = D = 2$ - орбитальному состоянию атома. Квантовое число, соответствующее полному моменту атома при *L-S* связи $J = L + S, L + S - 1, ..., |L - S|$. По условию задачи полный момент имеет максимальное значение, то есть его квантовое число имеет значение $J = L + S = 2 + 1 = 3$

Подставим все квантовые числа, определяющие собственные значения моментов в (2) и получим:

$$\cos\theta = \frac{3\cdot(3+1) - 2\cdot(2+1) + 1\cdot(1+1)}{2\sqrt{3\cdot(3+1)}\sqrt{1\cdot(1+1)}} \approx 0{,}8165 \qquad (3)$$

$$\theta = ar\cos(0{,}8165) = 35{,}2^0 \qquad (4)$$

Во втором пункте условия дан атом, у которого, кроме заполненных подоболочек, есть еще три электрона в состояниях $l_1 = p = 1, l_2 = d = 2, l_3 = f = 3$. Они и определяют полный момент атома. Для заполненных оболочек он равен нулю. Для остальных, с учетом требования максимума полного момента, он определяется соотношением:

$$J = L + S \qquad (5)$$

Согласно правилу сложения орбитальных моментов, максимальный полный орбитальный момент равен:

$$L = l_1 + l_2 + l_3 = 6 \qquad (6)$$

Согласно правилу сложения спиновых моментов, максимальный полный спиновый момент равен:

$$S = s_1 + s_2 + s_3 = \frac{3}{2} \qquad (7)$$

Подставляя (6) и (7), в (5), получаем:

$$J = L + S = 6 + \frac{3}{2} = 7\frac{1}{2} \qquad (8)$$

Используя (6) – (8) в соотношении (2), найдем искомый угол:

$$\cos\theta = \frac{\frac{15}{2}\cdot\left(\frac{15}{2}+1\right) - 6\cdot(6+1) + \frac{3}{2}\cdot\left(\frac{3}{2}+1\right)}{2\sqrt{\frac{15}{2}\cdot\left(\frac{15}{2}+1\right)}\sqrt{\frac{3}{2}\cdot\left(\frac{3}{2}+1\right)}} \approx 0{,}8246 \qquad (9)$$

$$\theta = ar\cos(0{,}8246) = 34{,}4^0 \qquad (10)$$

Ответ: искомые углы между полным и спиновым механическими моментами соответственно равны: 1) $\theta = 35{,}2^0$; 2) $\theta = 34{,}4^0$.

Задание №2. Найти число электронов в атомах, у которых заполнены:

1) K и L – оболочки, 3s – подоболочка и на 50% 3p – подоболочка;
2) K, L и M – оболочки, 4s и 4p – подоболочки. Что это за атомы?

Решение:

Согласно идеальной схеме заполнения оболочек атома, K – оболочка соответствует главному квантовому числу *n*=1. На ней находятся 2 электрона. L – оболочке соответствует главное квантовое число *n*=2 и 8 электронов. 3s – подоболочке соответствует 2 электрона, а на 50% заполненной 3p – подоболочке - $\frac{1}{2}\cdot 6 = 3$ - электронов. Таким образом, общее число электронов соответствует:

$$N_e = 2 + 8 + 2 + 3 = 15$$

Столько электронов имеет элемент V группы – фосфор (P).

Такие же рассуждения проведем для второй части задачи. K – оболочка соответствует главному квантовому числу *n*=1. На ней находятся 2 электрона. L – оболочке соответствует главное квантовое число *n*=2 и 8 электронов, а M - оболочке соответствует главное квантовое число *n*=3 и 18 электронов. 4s – подоболочке соответствует 2 электрона, а на 3p – подоболочке - 6 электронов. Таким образом, общее число электронов соответствует:

$$N_e = 2 + 8 + 18 + 2 + 6 = 36$$

Столько электронов имеет инертный газ – криптон (Kr).

Ответ: искомые элементы: фосфор (15 - электронов) и криптон (36 электронов).

Задание №3. Считая поправку в законе Мозли равной единице, найти: 1) каким элементам принадлежат K_α - линии с длинами волн 193,5; 178,7; 165,6 и 143,4 пм;

какова длина волны K_α - линии элемента пропущенного в этом ряду; 2) сколько элементов содержится в ряду между элементами, у которых длины волн K_α - линий равны 250 и 179 пм.

Решение:

K_α - линия соответствует переходу электронов между уровнями *n*=2 и *n*=1. Следовательно, частота перехода равна:

$$\omega_{K_\alpha} = T(1) - T(2) \qquad (1)$$

Общий вид рентгеновского терма:

$$T(n) = \frac{R}{n^2}(Z-a)^2 \qquad (2)$$

Подставим (2) в соотношение (1) и получим:

$$\omega_{K_\alpha} = \frac{R}{1^2}(Z-a)^2 - \frac{R}{2^2}(Z-a)^2 = \left(1-\frac{1}{4}\right)R(Z-a)^2 = \frac{3}{4}R(Z-a)^2 \qquad (3)$$

По условию поправка $a_n = 1$, следовательно (3) примет вид:

$$\omega_{K_\alpha} = \frac{3}{4}R(Z-1)^2 \qquad (4)$$

Выразим длину волны, соответствующую частоте:

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega_{K_\alpha}} = \frac{8\pi c}{3R(Z-1)^2} \qquad (5)$$

Используя (5) можно выразить Z – порядковый номер элемента и по нему определить искомый элемент с помощью таблицы Менделеева:

$$(Z-1)^2 = \frac{8\pi c}{3R\lambda} \qquad (6)$$

$$Z = \sqrt{\frac{8\pi c}{3R\lambda}} + 1 \qquad (7)$$

Подставляя в (7) длины волн из задания 1) можем определить недостающий элемент в цепочке:

При $\lambda_1 = 193{,}5$ пм, $Z_1 = 26$, что соответствует железу (Fe).

При $\lambda_2 = 178{,}7$ пм, $Z_2 = 27$, что соответствует кобальту (Co).

При $\lambda_3 = 165{,}6$ пм, $Z_3 = 28$, что соответствует никелю (Ni).

При $\lambda_4 = 143{,}4$ пм, $Z_4 = 30$, что соответствует цинку (Zn).

В этом ряду отсутствует медь (Cu) с порядковым номером $Z = 29$. Найдем длину волны K_α - линии для этого элемента с помощью соотношения (5):

$$\lambda = \frac{8 \cdot 3{,}14 \cdot 3 \cdot 10^8\ м/с}{3 \cdot 2{,}067 \cdot 10^{16} c^{-1} \cdot (29-1)^2} = 155 \text{ пм} \qquad (8)$$

Подставляя в (7) длины волн из задания 2) можем определить количество элементов между полученными:

При $\lambda_1 = 250$ пм, $Z_1 = 23$, что соответствует ванадий (V).

При $\lambda_2 = 179$ пм, $Z_2 = 27$, что соответствует кобальту (Co).

Между этими элементами находятся **три элемента:** хром (Cr) с Z=24, марганец (Mn) с Z=25 и железо (Fe) с Z=26.

Ответ: 1) Cu, $\lambda = 155$ пм; 2) три элемента.

Атом в электромагнитном поле
Справочный материал к тестированию по теме

Атом активно взаимодействует с электромагнитным полем, благодаря своему специфическому строению. Это взаимодействие приводит к перестройке энергетических уровней и состояний атома. Электромагнитное поле чаще всего частично снимает вырождение энергетических уровней атома, приводя к их дополнительному расщеплению и появлению дополнительных линий излучения в спектрах. Задачи на взаимодействие атома с электромагнитным полем в квантовой механике решаются с помощью уравнений Шредингера, гамильтонианы которых содержат не только информацию об атоме, но и о соответствующем поле. Атом и электромагнитное поле при этом рассматриваются как единая квантовая система. Однако для анализа таких взаимодействий могут быть использованы и более упрощенные методики.

Например, взаимодействие атома с **постоянным магнитным полем** можно описать с помощью векторной модели атома. Причем результат описания будет зависеть от величины магнитного поля (эффект Зеемана или Пашена - Бака). Векторная модель также используется для анализа магнитомеханических явлений.

Эффектом Зеемана называют явление расщепления линий спектра излучения при помещении атома в слабое внешнее магнитное поле. Он бывает сложным (аномальным) и простым (нормальным). Слабым магнитным полем можно считать такое поле, энергия взаимодействия которого с орбитальным и спиновым магнитными моментами атома меньше, чем энергия спин орбитального взаимодействия. При эффекте Зеемана магнитное поле взаимодействует с полным моментом атома как целым, а ***L-S*** связь не разрывается. Если полный спин атома равен нулю, то в слабом поле наблюдается простой (нормальный) эффект Зеемана, если отличен от нуля, то имеет место сложный эффект Зеемана. В простом эффекте Зеемана каждая линия излучения расщепляется на три.

Взаимодействие слабого магнитного поля с полным магнитным моментом атома приводит к расщеплению энергетического уровня на $2J+1$ подуровня. В результате усложняется и спектр излучения атома. Причем возможные линии и соответствующие им переходы определяются правилами отбора: $\Delta L = \pm 1$, $\Delta J = 0, \pm 1$ ($J = 0$ не комбинируется с $J = 0$), $\Delta m_J = 0, \pm 1$(комбинация $m_J = 0$ и $m_J = 0$ запрещена для $\Delta J = 0$), $\Delta S = 0$. Полная энергия атома во внешнем магнитном поле есть сумма его внутренней энергии и энергии взаимодействия полного магнитного момента атома с магнитным полем. При сложном эффекте Зеемана расщепление переменно и равно рациональной дроби от нормального. Величина расщепления при эффекте Зеемана меньше, чем при наличии мультиплетности спектров у атомов, связанной со спин орбитальным взаимодействием.

Эффект Пашена – Бака представляет собой явление разрыва ***L-S*** связи в сильном магнитном поле. Причем под **сильным магнитным полем** понимают такое поле, энергия взаимодействия которого с магнитным моментом атома больше энергии его спин - орбитального взаимодействия. Полная энергия атома в этом

случае равна алгебраической сумме внутренней энергии атома и энергий взаимодействия магнитного поля с орбитальным и спиновым магнитными моментами.

Эффект Пашена - Бака приводит к расщеплению энергетических уровней атома на подуровни и, следовательно, к появлению новых линий излучения в спектрах атома. Каждая линия излучения расщепляется на три подуровня, как и в простом эффекте Зеемана. Величина расщепления уровней в этом эффекте больше естественного мультиплетного расщепления. Правила отбора при этом имеют вид: $\Delta m_L = 0, \pm 1$, $\Delta m_S = 0$.

Взаимодействие внешнего магнитного поля с атомами вещества приводит к возникновению **магнитомеханических явлений в атомной физике**. Причиной магнитомеханических явлений служит наличие связи между магнитным и орбитальным моментами атомов вещества. Магнитомеханические явления связаны с опытами Эйнштейна - де Гааза и эффектом Барнетта. Суть магнитомеханических явлений заключается в том, что при изменении, под воздействием некоторых причин, одного момента атома изменяется и другой момент согласно линейной связи между ними. Таким образом, при помещении образца во внешнее магнитное поле его полный магнитный момент будет взаимодействовать с полем и изменит свое направление. Это приведет к изменению полного орбитального момента и вызовет вращение образца.

Такой опыт был поставлен в 1914 году **Эйнштейном** и **де Гаазом**. Опыт проводился с ферромагнитным образцом. Магнитное поле создавалось соленоидом в центре, которого располагался цилиндрический образец, подвешенный на нити. Магнитное поле было ориентировано вдоль оси симметрии образца. При изменении полного магнитного момента, связанного с взаимодействием магнитного поля с веществом, изменяется полный орбитальный момент, что приводит к вращению образца в направлении противоположном этому изменению, так как должен выполняться закон сохранения импульса для замкнутой системы. В данном опыте гиромагнитное отношение было равно двум, что соответствует отношению для спина. На основе этого опыта впервые было сделано предположение о связи магнетизма ферромагнетиков со спиновым магнетизмом электронов в атомах. Впоследствии оно подтвердилось и теоретически и экспериментально.

Эффект Барнетта является обратным по отношению к опытам Эйнштейна и де Гааза. В этом эффекте образец приводиться во вращение с постоянной угловой скоростью, что приводит к изменению его полного механического момента, а, следовательно, и механических моментов отдельных атомов. Эти изменения согласуются с законом сохранения механического момента импульса. Так как механический момент изменяется, то, согласно соотношению, устанавливающему связь между механическим и магнитным моментами, вещество должно намагнититься из-за изменения второго. Отсюда можно сделать вывод о том, что вращение образца с постоянной угловой скоростью эквивалентно помещению его в магнитное поле. Теоретически и экспериментально установлено, что эффект Барнетта обусловлен диамагнитным механизмом намагничивания.

Атом, будучи нейтральной системой состоящей из заряженных частей (ядра и электронов) может взаимодействовать не только с магнитным, но и однородным электрическим полем. **Эффектом Штарка** называют расщепление энергетических уровней атома во внешнем однородном электрическом поле (то есть снятие

вырождения соответствующих уровней энергии). Этот эффект бывает линейным и квадратичным по напряженности внешнего электрического поля. **Поправка** к основной энергии атома во внешнем электрическом поле рассчитывается **по теории возмущения**. При этом учитывается вырождение энергетического спектра рассматриваемого атома. Как известно у водородоподобных атомов имеется **вырождение по орбитальному квантовому числу** (энергия не зависит от l). Поэтому первая поправка по теории возмущений отлична от нуля и пропорциональна **напряженности электрического поля**. Для многих других атомов вырождение по l снято. Поэтому при фиксированных квантовых числах n и l имеется **вырождение по магнитному числу** $\boldsymbol{m}$, кратность которого $2l+1$. В этом случае различные волновые функции, отвечающие состоянию с фиксированными числами n и l, обладают одинаковой четностью и матричные элементы энергии возмущения равны нулю. Следовательно, **первая поправка равна нулю** и учитывается только вторая поправка, пропорциональная квадрату напряженности. Таким образом, смещение уровней пропорционально напряженности электрического поля при линейном эффекте и квадрату напряженности в квадратичном эффекте Штарка в зависимости от характера вырождения энергетических уровней рассматриваемых атомов в отсутствии внешних полей.

Еще одним интересным явлением, возникающим благодаря взаимодействию электромагнитного излучения с атомом, является **комбинационное рассеяние**. Оно широко применяется при изучении строения молекул и их электромагнитных свойств. В случае комбинационного рассеяния квантовая система – атом может помимо излучения на частоте падающего света, создать излучение на изменённой частоте. Рассеяние с изменением частоты является некогерентным и называется комбинационным. Оно было открыто независимо Раманом и Кришнаном в жидкостях и газах и Мандельштамом и Ландсбергом в твердых телах. Комбинационное рассеяние бывает **стоксовым** – с уменьшением частоты рассеянного фотона и **антистоксовым** - с увеличением частоты рассеянного фотона.

Рассмотрим механизмы комбинационного рассеяния. Молекулы, состоящие из двух и более атомов, имеют более сложный энергетический спектр (он будет подробно рассмотрен в следующей теме) по сравнению с атомами его составляющими. Этот спектр состоит из электронных, колебательных и вращательных уровней, которые являются дискретными. Комбинационное рассеяние возникает при переходах, как между колебательными, так и между вращательными уровнями. Механизмы рассеяния при этом аналогичны. Пусть разность энергий между соседними уровнями равна $\hbar\Omega$. Если молекула поглощает падающий фотон с энергией $\hbar\omega$, то энергия $\hbar\Omega$ при определенных условиях может быть затрачена на переход молекулы на более высокий энергетический уровень. В этом случае излучится рассеянный фотон с частотой $\hbar(\omega-\Omega)$, что соответствует стоксовому комбинационному рассеянию. Если молекула переходит на более низкий энергетический уровень, то она может передать энергию $\hbar\Omega$ рассеянному фотону и его полная энергия будет равна: $\hbar(\omega+\Omega)$ - антистоксовое комбинационное рассеяние. При низких температурах распределение молекул соответствует Больцмановскому. Поэтому число молекул, участвующих в формирование стоксовых компонент больше, чем антистоксовых. Поэтому интенсивность первых будет больше интенсивности вторых. С ростом температуры это различие уменьшается.

Основные соотношения:

Полная энергия атома **в слабом магнитном поле** (эффект Зеемана): $E = E_0 - \left(\vec{\mu}_J, \vec{B}\right) = E_0 - \mu_{Jz} \cdot B$

где E_0 - внутренняя энергия атома в отсутствии поля, $\left(\vec{\mu}_J, \vec{B}\right)$ - энергия взаимодействия магнитного поля и полного момента атома, а вектор индукции магнитного поля направлен по *OZ*.

Энергия перехода атома между состояниями 1 и 2 **в слабом магнитном поле**: $\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1$

$$\hbar\omega_{12} = \hbar\omega - \left(\mu_{J2z} - \mu_{J1z}\right)B$$

где $E_2^0 - E_1^0 = \hbar\omega$ - энергия перехода между состояниями 1 и 2 в отсутствии магнитного поля.

Связь между **полным магнитным моментом** и **магнитным** квантовым **числом**: $\mu_{Jz} \cdot B = g_J \mu_Б m_J B = g_J \hbar\omega_L m_J$

где $\omega_L = \dfrac{eB}{2m_e}$ - ларморова частота.

Частота перехода атома между состояниями 1 и 2 **в слабом магнитном поле**: $\omega_{12} = \omega - \omega_L\left(g_{J2}m_{J2} - g_{J1}m_{J1}\right)$

Данное соотношение дает расщепление спектральных линий в сложном эффекте Зеемана.

Разность частот спектральных линий излучения **в сложном эффекте Зеемана**: $\Delta\omega = \omega_{12} - \omega = \omega_L\left(g_{J2}m_{J2} - g_{J1}m_{J1}\right)$

Разность частот спектральных линий излучения **в простом эффекте Зеемана**: $\Delta\omega = \omega_{12} - \omega = \omega_L \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{cases} \omega_L \\ 0 \\ -\omega_L \end{cases}$

Полная энергия атома **в сильном магнитном поле** (эффект Пашена - Бака): $E = E_0 - \left(\vec{\mu}_L, \vec{B}\right) - \left(\vec{\mu}_S, \vec{B}\right) = E_0 - \mu_{Lz} \cdot B - \mu_{Sz} \cdot B$

где E_0 - внутренняя энергия атома в отсутствии поля, $\left(\vec{\mu}_L, \vec{B}\right)$ - энергия взаимодействия магнитного поля и полного орбитального момента атома, $\left(\vec{\mu}_S, \vec{B}\right)$ -

энергия взаимодействия магнитного поля и полного спинового момента атома, а вектор индукции магнитного поля направлен по *OZ*.

Энергия перехода атома между состояниями 1 и 2 **в сильном магнитном поле**: $\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1$

$$\hbar\omega_{12} = \hbar\omega - (\mu_{L2z} - \mu_{L1z})B - (\mu_{S2z} - \mu_{S1z})B$$

где $E_2^0 - E_1^0 = \hbar\omega$ - энергия перехода между состояниями 1 и 2 в отсутствии магнитного поля.

Связь между **полными орбитальным и спиновым магнитными моментами** и соответствующими им **магнитными квантовыми числами**: $\mu_{Lz} \cdot B = g_L \mu_Б m_L B = \hbar\omega_L m_L$

$$\mu_{Sz} \cdot B = g_S \mu_Б m_S B = 2\hbar\omega_L m_S$$

Правила отбора для эффекта **Пашена – Бака**: $\Delta m_L = 0, \pm 1,\ \Delta m_S = 0$

Разность частот спектральных линий излучения **в эффекте Пашена - Бака**:

$$\Delta\omega = \omega_{12} - \omega = \omega_L \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{cases} \omega_L \\ 0 \\ -\omega_L \end{cases}$$

Потенциальная энергия электрона во внешнем однородном электрическом поле (вдоль оси *OZ*): $U = e\mathrm{E}r\cos\theta$

Ее следует рассматривать как возмущение к гамильтониану. Здесь E - напряженность внешнего однородного электрического поля.

Гамильтониан водородоподобного атома без возмущения: $\hat{H}^0 = \dfrac{\hat{p}^2}{2m_e} - \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

Поправка к энергии водородоподобного атома в однородном электрическом поле (вдоль оси *OZ*): $E^1 = 0, \pm 3e\mathrm{E}a_0$

В спектре атома образуется триплет. Причем один из трех уровней имеет такое же расположение, как и начальный и является двукратно вырожденным по орбитальному числу.

Варианты тестов промежуточного контроля по теме

ТЕСТ №1

1. Взаимодействие атома с электромагнитным полем приводит к перестройке _____ атома.
2. Чем обусловлен эффект Зеемана? Каким он бывает?
3. В каком магнитном поле разрывается *L-S* связь?
4. Полная энергия атома в слабом магнитном поле имеет вид _____.
5. Каковы правила отбора для эффекта Пашена - Бака
6. В чем суть эффекта Барнетта?
7. В каком эффекте величина расщепления уровней больше естественного мультиплетного расщепления?
8. В чем заключается суть эффекта Штарка
9. Поправка к энергии водородоподобного атома в однородном электрическом поле имеет вид _____.
10. При каких условиях возникает стоксовское комбинационное рассеяние?

ТЕСТ №2

1. На сколько подуровней расщепляется энергетический уровень в случае простого эффекта Зеемана?
2. Разрывается ли ***L-S*** связь при эффекте Зеемана?
3. При каком условии в слабом поле наблюдается сложный эффект Зеемана? (формула)
4. В каком эффекте величина расщепления уровней меньше естественного мультиплетного расщепления?
5. Разность частот спектральных линий излучения в сложном эффекте Зеемана равна _____.
6. Чему равна ларморова частота в СИ?
7. Какова связь между полным магнитным моментом и магнитным квантовым числом в эффекте Зеемана?
8. С помощью какого метода в квантовой механике можно рассчитать энергетические уровни во внешнем однородном электрическом поле?
9. Чему пропорционально смещение уровней при квадратичном эффекте Штарка?
10. При каких условиях возникает антистоксовское комбинационное рассеяние?

ТЕСТ №3

1. С помощью какой модели атома можно описать процесс его взаимодействия с постоянным магнитным полем?
2. Поле, энергия взаимодействия которого с орбитальным и спиновым магнитными моментами атома меньше, чем энергия спин орбитального взаимодействия называют _____.
3. На сколько линий в простом эффекте Зеемана расщепляется каждая линия излучения?
4. Частота перехода атома между состояниями 1 и 2 в слабом магнитном поле определяется соотношением _____.
5. Полная энергия атома в сильном магнитном поле равна _____.
6. Суть магнитомеханических явлений заключается в том, что _____.
7. Изменение какого момента приводит к эффекту Эйнштейна де Гааза?

8. Напишите потенциальную энергию электрического поля, которую следует рассматривать как возмущение к гамильтониану.
9. Чему пропорционально смещение уровней при линейном эффекте Штарка?
10. Запишите закон полного тока в интегральной форме.

ТЕСТ №4

1. Как называют явление расщепления линий спектра излучения при помещении атома в слабое внешнее магнитное поле?
2. При каком условии в слабом поле наблюдается простой (нормальный) эффект Зеемана?
3. В каком магнитном поле величина расщепления уровней меньше? Назовите эффект.
4. Разность частот спектральных линий излучения в эффекте Пашена – Бака описывается соотношением _____.
5. Какова связь между полным орбитальным магнитным моментом и соответствующим ему магнитным квантовым числом?
6. Взаимодействие слабого магнитного поля с полным магнитным моментом атома приводит к расщеплению энергетического уровня на _____ подуровней.
7. Энергия перехода атома между состояниями 1 и 2 в сильном магнитном поле имеет вид _____.
8. В однородном электрическом поле в спектре атома образуется _____.
9. В чем суть комбинационного рассеяния?
10. Какое рассеяние стоксовское или антистоксовское проявляется чаще при низких температурах? Почему?

Примеры заданий с решениями по теме

Задание №1. Вычислить множитель Ланде для атомов: 1) с одним валентным электроном в состояниях S, P и D; 2) в состоянии ^3P.

Решение:

Множитель Ланде можно рассчитать по формуле:

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \qquad (1)$$

В первом пункте условия даны атомы, у которых электроны в состояниях $l_1 = S = 0, l_2 = P = 1, l_3 = D = 2$. Для данных оболочек полный момент определяется соотношением:

$$J = L + S, L + S - 1, \ldots |L - S| \qquad (2)$$

Для всех состояний спиновый момент равен $S = 1/2$

В случае $l_1 = S = 0$, полный момент имеет только одно значение $J_1 = 1/2$.

В случае $l_2 = P = 1$, полный момент может иметь два значения $J_{21} = 1/2$ и $J_{22} = 3/2$ согласно соотношению (2)

Для $l_3 = D = 2$, полный момент может принимать также лишь два значения: $J_{31} = 1/2$ и $J_{32} = 3/2$

Вычислим для каждого случая множитель Ланде с помощью соотношения (1). Для состояния $l_1 = S = 0$:

$$g_{1/2} = 1 + \frac{\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right) - 0\cdot(0+1) + \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right)}{2\cdot\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right)} = 2 \qquad (3)$$

Для состояния $l_2 = P = 1$:

$$g_{1/2} = 1 + \frac{\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right) - 1\cdot(1+1) + \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right)}{2\cdot\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right)} = 2/3 \qquad (4)$$

$$g_{3/2} = 1 + \frac{\frac{3}{2}\cdot\left(\frac{3}{2}+1\right) - 1\cdot(1+1) + \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right)}{2\cdot\frac{3}{2}\cdot\left(\frac{3}{2}+1\right)} = 4/3 \qquad (5)$$

Для состояния $l_3 = D = 2$:

$$g_{3/2} = 1 + \frac{\frac{3}{2}\cdot\left(\frac{3}{2}+1\right) - 2\cdot(2+1) + \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right)}{2\cdot\frac{3}{2}\cdot\left(\frac{3}{2}+1\right)} = 4/5 \qquad (6)$$

$$g_{5/2} = 1 + \frac{\frac{5}{2}\cdot\left(\frac{5}{2}+1\right) - 2\cdot(5+1) + \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right)}{2\cdot\frac{5}{2}\cdot\left(\frac{5}{2}+1\right)} = 6/5 \qquad (7)$$

Во втором пункте задачи дано состояние атома ^3P. Если сравнить его со схемой обозначения таких состояний, то верхний индекс соответствует $2\cdot S + 1 = 3$ ($S = 1$), а $L = P = 1$ - орбитальному состоянию атома. Квантовое число, соответствующее полному моменту атома при *L-S* связи $J = L + S, L + S - 1, \ldots, |L - S|$. Следовательно, возможны следующие значения полных моментов: $J_1 = 2$, $J_2 = 1$ и $J_3 = 0$. То есть для данного состояния в зависимости от значения полного момента возможны три множителя:

Для $J_1 = 2$:

$$g_2 = 1 + \frac{2\cdot(2+1) - 1\cdot(1+1) + 1\cdot(1+1)}{2\cdot 2\cdot(2+1)} = \frac{3}{2} \qquad (6)$$

Для $J_2 = 1$:

$$g_1 = 1 + \frac{1\cdot(1+1) - 1\cdot(1+1) + 1\cdot(1+1)}{2\cdot 1\cdot(1+1)} = \frac{3}{2} \qquad (7)$$

Из (6) и (7) видно, что для ^3P состояния атома оба множителя одинаковы и равны $3/2$.

Для $J_3 = 0$

$$g_0 = 1 + \frac{0\cdot(0+1) - 1\cdot(1+1) + 1\cdot(1+1)}{2\cdot 0\cdot(0+1)} = \frac{0}{0} \qquad (8)$$

Ответ: 1) 2 (S); $2/3$ и $4/3$ (P); $4/5$ и $6/5$ (D); 2) $3/2$ ($^3P_1$ и $^3P_2$) и $0/0$ ($^3P_0$).

Задание №2. Интервал между крайними компонентами спектральной линии $\lambda = 525$ нм, обнаруживающей простой эффект Зеемана, составляет $\Delta\lambda = 22$ пм. Найти интервал, эВ, между соседними подуровнями зеемановского расщепления соответствующих термов.

Решение:

Энергетический интервал между соседними подуровнями зеемановского расщепления соответствующих термов можно найти по формуле:

$$\Delta E = \hbar\Delta\omega \qquad (1)$$

Разность частот спектральных линий излучения в простом эффекте Зеемана определяется соотношением:

$$\Delta\omega = \omega_{12} - \omega = \omega_L \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{cases} \omega_L \\ 0 \\ -\omega_L \end{cases} \qquad (2)$$

Найдем связь между разностью частот и разностью длин волн, учитывая, что разность длин волн дана между крайними компонентами спектральной линии:

$$2\cdot d\omega = d\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right) = -\frac{2\pi c}{\lambda^2}d\lambda \qquad (3)$$

Перейдем в (3) от дифференциалов к приращениям и выразим разность частот спектральных линий излучения в простом эффекте Зеемана:

$$\Delta\omega = \frac{\pi c}{\lambda^2}\Delta\lambda \qquad (4)$$

Подставим (4) в соотношение (1) и получим величину энергетического интервала между соседними подуровнями зеемановского расщепления:

$$\Delta E = \hbar\Delta\omega = \frac{\pi\hbar c}{\lambda^2}\Delta\lambda \qquad (5)$$

Подстановка значений в (5) дает величину:

$$\Delta E = \frac{3{,}14\cdot 1{,}054\cdot 10^{-34}\,Дж\cdot с\cdot 3\cdot 10^8\,м/с}{525^2\cdot 10^{-18}\,м^2}\,22\cdot 10^{-12}\,м = 7{,}925\cdot 10^{-24}\,Дж = 4{,}95\cdot 10^{-5}\,эВ$$

Ответ: $\Delta E = 4{,}95\cdot 10^{-5}\,эВ$

Задание №3. Механический момент атома в состоянии ^3F прецессирует в магнитном поле $B = 500$ Гс с угловой скоростью $\omega = 5{,}5\cdot 10^9$ рад/с. Определить механический и магнитный моменты атома.

Решение:

В задаче предложено рассмотреть атом в состоянии ^3F. Если сравнить его со схемой обозначения таких состояний, то верхний индекс соответствует $2\cdot S+1=3$ ($S=1$), а $L=F=3$ - орбитальному состоянию атома. Квантовое число, соответствующее полному моменту атома при *L-S* связи $J=L+S, L+S-1,...,|L-S|$. Следовательно, возможны следующие значения полных моментов: $J_1=4$, $J_2=3$ и $J_3=2$. То есть для данного состояния в зависимости от значения полного момента возможны три множителя Ланде:

Для $J_1=4$:

$$g_4=1+\frac{4\cdot(4+1)-3\cdot(3+1)+1\cdot(1+1)}{2\cdot 4\cdot(4+1)}=\frac{5}{4} \qquad (1)$$

Для $J_2=3$:

$$g_3=1+\frac{3\cdot(3+1)-3\cdot(3+1)+1\cdot(1+1)}{2\cdot 3\cdot(3+1)}=\frac{13}{12} \qquad (2)$$

Для $J_3=2$

$$g_2=1+\frac{2\cdot(2+1)-3\cdot(3+1)+1\cdot(1+1)}{2\cdot 2\cdot(2+1)}=\frac{2}{3} \qquad (3)$$

Чтобы выбрать из всех возможных множителей Ланде, удовлетворяющий условию задачи, необходимо использовать соотношение для ларморовой частоты (частоты прецессии полного момента электрона атома в магнитном поле):

$$\omega_J=\frac{eB}{2m_e}g_J \qquad (4)$$

$$g_J=\frac{eB}{2m_e}\omega_J\approx 1{,}28 \qquad (5)$$

Значение в соотношении (5) в большей степени соответствует значению (1). Следовательно, для нахождения механического и магнитного моментов необходимо использовать $J_1=4$. Найдем эти значения, используя соотношения:

$$L_J=\hbar\sqrt{J(J+1)} \qquad (6)$$

$$L_4=\hbar\sqrt{4\cdot 5}=2\sqrt{5}\hbar \qquad (7)$$

$$\mu_J=\mu_Б g_J\sqrt{J(J+1)} \qquad (8)$$

$$\mu_4=\mu_Б g_4\sqrt{4\cdot 5}=\frac{5}{4}\cdot 2\sqrt{5}\mu_Б=2{,}5\cdot\sqrt{5}\mu_Б \qquad (9)$$

Ответ: $L_4=2\sqrt{5}\hbar$, $\mu_4=2{,}5\cdot\sqrt{5}\mu_Б$.

Молекулы
Справочный материал к тестированию по теме

Молекула всякого вещества является сложным, нейтральным образованием, состоящим из двух и более атомов одного или различных типов. Между этими атомами существует определенная связь, обеспечивающая устойчивость молекулы. Как показывают многочисленные исследования, силы, отвечающие за связь между

атомами в молекуле, имеют электромагнитную природу. Связь, возникающая между атомами за счет электромагнитного взаимодействия, называют **химической связью**. Выделяют два основных вида химической связи:

1. **ионная** – обеспечивается силами притяжения между разноименными электрическими ионами, составляющими молекулу;
2. **ковалентная** – обеспечивается обобществленными электронами, электронными парами, образование которых может быть объяснено только с точки зрения квантовой механики.

Рассмотрим кратко формирование **ионной связи**. Как известно из курса химии наиболее стабильной является электронная конфигурация инертных газов, электронные оболочки которых замкнуты (то есть полностью заполнены соответствующие электронные состояния). Однако большинство атомов имеет незамкнутые электронные оболочки. Чтобы их оболочки перешли в более стабильное состояние они могут либо отдавать свои электроны, либо присоединять дополнительные электроны от других атомов. Это приводит к образованию положительных и отрицательных ионов с поглощением и выделением соответствующих **энергий**: **ионизации** и **сродства**.

Энергия необходимая для удаления электрона из атома называется **энергией ионизации**. Она противоположна по знаку и равна по модулю той энергии, которая выделяется при присоединении электрона к атому – **энергии сродства** к электрону.

Энергия ионизации является количественной мерой прочности связей внешних электронов с атомом. **Энергия сродства** – количественная мера прочности связи присоединенного электрона с положительным ионом. Ионизировать легче всего атомы щелочных и щелочноземельных металлов. Причем, чем больше порядковый номер элемента, тем энергия ионизации меньше. Энергия сродства также уменьшается с ростом порядкового номера галогена. Также энергии ионизации и сродства уменьшаются с ростом числа электронов, которые необходимо присоединить или удалить с внешней оболочки.

Ионная связь возникает между атомами в том случае, если полная энергия системы двух ионов, образующих молекулу, меньше полной энергии атомов, из которых эта молекула состоит. Это означает, что для разделения молекулы на атомы необходимо затратить дополнительную энергию.

Кроме сил кулоновского притяжения между ионами в молекуле имеются и силы отталкивания, обусловленные взаимодействием электронных оболочек ионов. При малых расстояниях между ионами их электронные оболочки начинают перекрываться и образуют единую электронную систему, что приводит к частичному снятию вырождения энергетических уровней атомов, составляющих молекулу. Так как этот процесс требует затрат энергии, то при перекрытии электронных оболочек между ионами молекулы возникают силы отталкивания. Стабильные состояния молекул возникают при равновесии этих сил. Ионная связь является слабой по сравнению с ковалентной.

Рассмотрим физические основы образования **ковалентной связи**. Электрон в поле ядра атома находиться в определенном квантовом состоянии с фиксированной энергией. При сближении ядер атомов, вступающих в ковалентную связь, кулоновская энергия отталкивания между ними должна возрастать, а энергия электрона уменьшаться более быстро. Поэтому в системе из двух отталкивающихся ядер и электрона действуют силы притяжения, ответственные за ковалентную связь. Они возникают из-за наличия общего электрона, которым

обмениваются атомы. Следовательно, эти силы притяжения являются обменными квантовыми силами.

Квантовомеханической моделью ковалентной связи можно считать систему одномерных квантовых ям с конечными стенками, находящимися на небольшом расстоянии, то есть ширина барьера между ямами мала. Благодаря наличию двух близкорасположенных потенциальных ям, энергетические уровни электрона расщепляются, то есть снимается вырождение. При этом энергия электрона в состояниях с антисимметричной волновой функцией повышается, а в состояниях с симметричной волновой функцией снижается. Так как в образовании ковалентной связи участвуют несколько электронов от различных атомов, то она является более прочной (двойной) по сравнению с ионной.

Молекулы как атомы могут быть описаны в рамках квантовой теории. Однако уравнение Шредингера уже для простейшей молекулы водорода имеет весьма сложный вид и его нельзя решить аналитически, без каких либо обоснованных приближений. Ион молекулы водорода в физике молекул играет такую же значимую роль, что и атом водорода в атомной физике и поэтому необходимо иметь для него приближенное аналитическое решение.

В качестве основного приближения применяется **приближение Борна – Оппенгеймера**, основывающееся на большом различии масс электронов и ядер атомов. Это приближение состоит в следующем: для любого момента времени ядра атомов можно принять за неподвижные и рассматривать электроны, движущиеся в их стационарном поле. Используя **приближение Борна – Оппенгеймера** можно рассчитать электронные состояния и получить решения для конкретных конформаций молекулы. Под **конформацией молекулы** понимают ее состояния с различным пространственным расположением атомов в каждом конкретном случае, которые характеризуется определенной потенциальной энергией взаимодействия этих атомов. Причем равновесной конформации молекулы соответствует минимальная потенциальная энергия. В случае двухатомных молекул конформации характеризуются различными расстояниями между ядрами, а для многоатомных – различным взаимным расположением ядер. Для каждой конформации рассчитывается потенциальная энергия молекулы и выражается через параметры, ее характеризующие. Минимум потенциальной энергии соответствует равновесной конформации молекулы. Приближение Борна – Оппенгеймера позволяет получить аналитическое решение уравнения Шредингера для иона молекулы водорода, хотя оно и является достаточно громоздким.

Для описания более сложных по сравнению с молекулой водорода систем с ковалентной связью используются такие **методы** как:

1. метод орбиталей;
2. метод валентных связей.

В совокупности они могут наиболее наглядно охарактеризовать структуру молекулы.

Метод орбиталей исходит из допущения, что волновая функция молекулы может быть представлена в виде суммы или разности волновых функций атомов ее составляющих. В этом методе истинные молекулярные орбитали заменяются подходящими линейными комбинациями атомных орбиталей. Этот метод с самого начала рассматривает молекулу как систему, внешние электроны которой принадлежат всей молекуле и не могут быть отнесены к каким-либо определенным атомам этой молекулы. С точки зрения этой модели формирование ковалентной

связи двумя электронами с противоположными спинами сводится к тому, что плотность электронного облака увеличивается в случае противоположно направленных спинов. А, как известно, существование молекулы обеспечивается наличием этой высокой концентрации. При сонаправленных спинах концентрация электронного облака не увеличивается.

Метод валентных связей определяется понятием валентности. Валентность определяется числом электронов со свободными спинами, которые могут вступать в обмен с соответствующим числом электронов другого атома. Валентность для различных конфигураций электронов внешней оболочки атома может быть различной. Валентность атома в возбужденном состоянии может отличаться от его валентности в основном состоянии. Обычно под валентностью понимается валентность в основном состоянии. Метод валентных связей основывается на допущении, что молекула в целом представима как система отдельных атомов, достаточно четко отделенных друг от друга. Отдельные атомы связаны друг с другом хорошо локализованными ковалентными связями, каждая из которых образуется за счет двух электронов с противоположно направленными спинами. Причем один электрон относится к одному атому, а другой к другому в отличие от метода орбиталей. Орбитали атомов, участвующих в ковалентной связи, можно считать в первом приближении идентичными орбиталям изолированного атома. В случае количественной оценки учитываются модификации орбиталей, связанные с различного рода взаимодействиями.

Как известно **молекулярные спектры** в отличие от спектров отдельных атомов не являются линейчатыми. Они называются **полосатыми**. Образование таких спектров обусловлено колебаниями атомов в молекулах, вращением самих молекул и переходами между энергетическими состояниями внешних электронов молекулы. Поэтому энергетический спектр молекулы не является полностью дискретным как у отдельных атомов. Существуют **три** основных **фактора**, которые определяют **энергетическое состояние молекулы**:

1. **Вращение** молекулы как целого.
2. **Колебание** атомов в молекуле.
3. **Состояние движения электронов** в молекуле.

Между вращательными энергетическими уровнями расстояние минимально, порядка 10^{-3} эВ. Поэтому длины волн излучения, связанного с переходами между этими уровнями, находятся в пределах от 0,1 мм до 1 см. Колебательные уровни находятся на расстояниях порядка 0,1 эВ, а длины волн излучения, возникающего при переходах между ними, от 1 мкм до 0,1 мм. Энергетические состояния валентных электронов расположены на расстояниях порядка нескольких - электрон вольт, что по длинам волн соответствует видимому и ультрафиолетовому свету.

Вращение молекул и их спектры. Самыми простейшими являются двухатомные молекулы. Атомы таких молекул и их центр масс лежат на одной прямой. **Момент инерции** J относительно прямой перпендикулярной центру масс двухатомной молекулы равен произведению ее приведенной массы μ на квадрат расстояния между атомами R и является числом. **Момент импульса** L определяется как произведение момента инерции J на угловую скорость ω, а **вращательная энергия** – как половина произведения момента инерции J на квадрат угловой скорости ω. Таким образом, **вращательную энергию** можно выразить через момент импульса и, учитывая особенности квантовомеханического описания, получить ее зависимость от **орбитального квантового числа** l. То есть

вращательная энергия двухатомной жесткой молекулы квантована по орбитальному числу *l*. Расстояние между атомами **жесткой молекулы** не изменяется при вращении. Однако **реальные молекулы** чаще всего являются **эластичными** (расстояние между ними возрастает за счет действия центробежной силы). В связи с этим к вращательной энергии добавляется энергия упругой деформации (с отрицательным знаком), которая также зависит от орбитального числа. Таким образом, соответствующие уровни энергии понижаются относительно жесткой молекулы. Разность энергии растет с увеличением значения *l* и уменьшением жесткости *D*. Если многоатомные молекулы лежат на одной оси, то для них верны все выводы, относящиеся к двухатомной молекуле. Если они не лежат на одной прямой, то молекулу следует рассматривать как объемное тело, которому соответствует некий тензор инерции. Он наиболее прост, когда оси координат совпадают с главными осями инерции, которым соответствуют три главных момента инерции. В этом случае энергия вращения зависит не только от орбитального числа *l*, но и от магнитного числа *m*. Многоатомные молекулы также могут быть эластичными и поправки, связанные с энергией упругой деформации для них определяются по тем же принципам, что и для двухатомных молекул.

Вращательные спектры дают молекулы с отличным от нуля дипольным электрическим моментом. Поэтому у симметричных молекул типа H_2, CO_2, CH_4 вращательные спектры отсутствуют. Вращательные спектры, отвечают следующим правилам отбора: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$. Расстояние между линиями в спектре эластичной молекулы не постоянно как в жесткой, а с увеличением *l* уменьшается. При комнатных температурах молекулы находятся в сильно возбужденных состояниях с большими *l*, для которых уменьшение расстояния между линиями излучения может быть значительным и его необходимо учитывать.

Колебательные спектры молекул. Атомы в молекуле будут находиться в устойчивом равновесном состоянии только при минимальной потенциальной энергии, которая является функцией расстояния между ними. При изменении этого расстояния в молекуле начинают действовать силы, стремящиеся его восстановить. В результате атомы в молекуле будут совершать колебания относительно своих положений равновесия. Если колебания малые, то они будут аналогичны колебаниям гармонического осциллятора. Колебательная энергия молекулы может быть представлена как энергия гармонического осциллятора с приведенной массой в квантовой механике, которая является функцией от главного квантового числа *n*. Следует отметить, что для квантового осциллятора характерно наличие нулевой энергии колебаний при *n*=0.

У двухатомных молекул одна внутренняя (колебательная) степень свободы, обусловленная деформациями растяжения и сжатия вдоль линии связи молекул. У многоатомных нелинейных молекул число внутренних степеней свободы 3*N*-6, а у линейных - 3*N*-5. Многоатомные молекулы могут иметь степени свободы, связанные не только с линейными деформациями сжатия и растяжения, но и с другими видами деформации (например, изгиба). Всякой степени свободы соответствует определенная мода колебаний. Расстояние между колебательными уровнями у дна потенциальной ямы, которое определяется минимальной потенциальной энергией молекулы, много больше, чем между ее вращательными уровнями. Поэтому их вклад в спектр молекулы может быть значительным. Правила отбора для переходов между колебательными состояниями в гармоническом приближении такое же, как и для гармонического осциллятора:

$\Delta n = \pm 1$. В первом приближении колебание и вращение молекул можно считать независимым. Тогда собственные значения энергии для двухатомных молекул можно представить как сумму независимых колебательной (энергии гармонического осциллятора) и вращательной энергий. Такая энергия зависит от двух квантовых чисел *n* и *l*. Правила отбора при этом будут иметь вид: $\Delta n = \pm 1$, $\Delta l = \pm 1$. В случае многоатомных молекул правила отбора и спектры значительно усложняются и в общем случае завися сразу от трех квантовых чисел, характеризующих состояние молекулы: *n, l* и *m*.

В спектрах газов изолированные линии колебательного спектра не наблюдаются, так как вращательные уровни сильно возбуждены по сравнению с колебательными уровнями (вращательные уровни возбудить легче). Наиболее отчетливо колебательные спектры можно наблюдать в жидкостях. Это связано с ближним порядком в расположении молекул и их сильным взаимодействием между собой. Их вращательные состояния развиты слабо.

Электронные спектры молекул. Эти спектры образуются за счет оптических переходов между электронными уровнями внешних электронов молекул. Расстояние между электронными уровнями молекулы соизмеримы с теми же расстояниями у атомов и имеют порядок до нескольких электрон-вольт. То есть при переходах между такими уровнями поглощаются и излучаются фотоны оптического (видимого) диапазона. При электронном переходе меняется конфигурация электронной оболочки, а, следовательно, меняются силы притяжения между ядрами и их колебательное и вращательное движение. Это приводит к изменению вращательно-колебательных состояний молекулы и вместо дискретных линий образуется спектральная полоса. Поэтому спектры молекул являются полосатыми. Однако из-за кратковременности процессов электронных переходов по сравнению с изменением колебательных и вращательных состояний, можно считать, что атомы в молекуле неподвижны. Это предположение называют **принципом Франка – Кондона**. Он позволяет значительно упростить анализ спектров молекул. Согласно этому принципу можно сформулировать правила отбора для электронных переходов: электронный переход в молекуле происходит лишь между теми участками колебательных уровней, которые на схеме энергетических уровней находятся на одной вертикали, а вероятность перехода определяется произведением вероятностей пребывания на соответствующих участках колебательных уровней. Электронные состояния молекулы классифицируются аналогично электронным состоянием атома. Они обозначаются большими буквами греческого алфавита Σ, Π, Δ, Φ, Γ, …. Каждому электронному состоянию молекулы соответствует определенная суммарная проекция орбитального момента импульса на ось молекулы 0, 1, 2, 3, 4, … (она сохраняется). Кроме значения этой проекции состояния различаются суммарным спином всех электронов. Если спин-орбитальным приближением пренебречь, то энергетические уровни не зависят от проекции спина и являются вырожденными. При учете спин-орбитального взаимодействия это вырождение снимается и его кратность равна $2S+1$, где S – суммарный спин всех электронов. Число $2S+1$ называется **мультиплетностью** электронного состояния. Мультиплетность уровней указывается индексом в левом верхнем углу буквенного обозначения состояния ($^1\Sigma$ - электроны с антипараллельными спинами (S=0), $^3\Sigma$ - электроны с параллельными спинами (S=1)). Расстояния между электронными уровнями больше, чем между колебательными и вращательными уровнями.

Основные соотношения:

Момент инерции двухатомной молекулы

относительно центра масс: $J = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu R^2$

где $\mu = \dfrac{m_2 m_1}{m_1 + m_2}$ - приведенная масса молекулы, $m_1 r_1 = m_2 r_2$ - по определению центра масс, $R = r_1 + r_2$ - расстояние между атомами в молекуле, r_1 и r_2 - соответствующие расстояния от центра масс до атомов.

Момент импульса молекулы $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

Энергия вращения жесткой двухатомной молекулы $E_l = \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2J}$

Энергия вращения эластичной

двухатомной молекулы $E_l = \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} + \dfrac{\hbar^4 l^2 (l+1)^2}{2J^2 R^2 D}$

D - жесткость молекулы.

Вектор **полного момента импульса**

многоатомной молекулы $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \vec{L}_3$

Модуль момента импульса

многоатомной молекулы $L = \sqrt{L_1^2 + L_2^2 + L_3^2} = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

Энергия вращения жесткой

многоатомной молекулы $E = \dfrac{L_1^2}{2J_1} + \dfrac{L_2^2}{2J_2} + \dfrac{L_3^2}{2J_3}$

где J_1, J_2, J_3 - главные моменты инерции, которые в общем случае $J_1 \neq J_2 \neq J_3$.

В случае аксиальной симметрии системы $J_1 \neq J_2 = J_3$. Тогда:

Энергия вращения жесткой

многоатомной молекулы $E = \dfrac{L_1^2}{2J_1} + \dfrac{L_2^2 + L_3^2}{2J_2}$

где $L_1 = \hbar m$, $L_2^2 + L_3^2 = \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2$.

Энергия вращения аксиально - симметричной

жесткой многоатомной молекулы $E_{l,m} = \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2J_2} + \dfrac{\hbar^2 m^2}{2}\left[\dfrac{1}{J_1} - \dfrac{1}{J_2}\right]$

Частота перехода между соседними

вращательными уровнями *l*+1 и *l* $\omega_{l+1\to l} = \dfrac{E_{l+1,m} - E_{l,m}}{\hbar} = \dfrac{\hbar(l+1)}{J_2}$

Разность частот между соседними

линиями излучения $\Delta\omega = \omega_{l+1,l} - \omega_{l,l-1} = \dfrac{\hbar(l+1)}{J_2} - \dfrac{\hbar l}{J_2} = \dfrac{\hbar}{J_2}$

Энергия колебаний молекулы

(гармонического осциллятора) $E_n = \hbar\omega_0\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$

Энергия двухатомной молекулы в первом приближении

для колебательно – вращательных спектров $$E_{n,l} = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J}$$

Частоты излучения для колебательно – вращательных спектров:

P – ветви $(\Delta l = -1)$ $$\omega_P = \frac{E_{1,l-1} - E_{0,l}}{\hbar} = \omega_0 - \frac{\hbar l}{J}$$

R – ветви $(\Delta l = +1)$ $$\omega_R = \frac{E_{1,l+1} - E_{0,l}}{\hbar} = \omega_0 + \frac{\hbar(l+1)}{J}$$

Переход с $\Delta l = 0$ - запрещен. Поэтому в спектре отсутствует линия на частоте ω_0.

Варианты тестов промежуточного контроля по теме

Тест№1

1. Назовите основные виды химической связи атомов в молекуле.
2. Какая величина характеризует количественную меру прочности связи присоединенного электрона с положительным ионом?
3. Чему равен момент инерции двухатомной молекулы относительно центра масс?
4. Между какими энергетическими уровнями (вращательными, колебательными, электронными) расстояние минимально?
5. Молекулы с отличным от нуля электрическим дипольным моментом дают вращательные спектры, отвечающие следующим правилам отбора ____.
6. Энергия вращения жесткой двухатомной молекулы имеет вид _____.
7. Частота перехода между соседними вращательными уровнями l+1 и l определяется соотношением _____.
8. В каких средах наиболее четко наблюдаются изолированные линии колебательных спектров?
9. Энергия двухатомной молекулы в первом приближении для колебательно – вращательных спектров имеет вид _____.
10. За счет каких переходов образуются электронные спектры молекул?

ТЕСТ№2

1. За счет чего обеспечивается ковалентная связь?
2. В чем состоит приближение Борна - Оппенгеймера?
3. Какие существуют методы описания ковалентной связи?
4. Момент импульса молекулы определяется соотношением ____.
5. Как называются молекулярные спектры?
6. Молекулы с отличным от нуля дипольным электрическим моментом дают _____ спектры?
7. Энергия вращения эластичной двухатомной молекулы имеет вид _____.
8. Правило отбора для переходов между колебательными состояниями в гармоническом приближении имеет вид _____.
9. Энергия колебаний молекулы определяется соотношением _____.
10. Между какими энергетическими уровнями (вращательными, колебательными, электронными) расстояние наибольшее?

ТЕСТ№3

1. Каким образом обеспечивается ионная связь?
2. Какая величина является количественной мерой прочности связей внешних электронов с атомом?
3. Метод орбиталей исходит из допущения, что волновая функция молекулы может быть представлена в виде _____.
4. У многоатомных линейных молекул число внутренних степеней свободы равно _____.
5. Разность частот между соседними линиями излучения для вращательных спектров определяется соотношением _____.
6. Энергия вращения аксиально - симметричной жесткой многоатомной молекулы имеет вид _____.
7. Атомы в молекуле будут находиться в устойчивом равновесном состоянии только при _____ потенциальной энергии.
8. Правила отбора для колебательно – вращательных спектров имеют вид _____.
9. В чем состоит принцип Франка – Кондона?
10. Сформулируйте правило отбора для электронных переходов.

ТЕСТ№4

1. При каких энергетических условиях возникает ионная связь?
2. Какая связь прочнее электронная или ионная и почему?
3. В каком методе описания ковалентной связи считается, что электроны принадлежат ко всей молекуле, а не к каждому атому в отдельности?
4. Энергия вращения эластичной молекулы есть сумма _____.
5. Какие уровни находятся на расстояниях порядка 0,1 эВ, а длины волн излучения, возникающего при переходах между ними от 1 мкм до 0,1 мм?
6. Энергия колебаний молекулы определяется соотношением _____.
7. У многоатомных нелинейных молекул число внутренних степеней свободы равно _____.
8. Энергия двухатомной молекулы в первом приближении для колебательно – вращательных спектров имеет вид
9. Частоты излучения для колебательно – вращательных спектров определяются как _____.
10. При электронных переходах излучаются фотоны ____ диапазона.

Примеры заданий с решениями по теме

Задание №1. Найти момент инерции молекулы CH и расстояние между ее ядрами, если интервал между соседними линиями чисто вращательного спектра этих молекул $\Delta\overline{\nu} = 29$ см$^{-1}$

Решение:

Момент инерции двухатомной молекулы относительно центра масс определяется соотношением:

$$J = \mu R^2 \qquad (1),$$

где $\mu = \dfrac{m_C m_H}{m_H + m_C} = 1{,}53 \cdot 10^{-27}$ *кг* - приведенная масса молекулы CH, R - расстояние между атомами в молекуле.

Разность частот между соседними линиями излучения можно найти из соотношения:

$$\Delta\omega = \frac{\hbar}{J} \qquad (2)$$

Разность частот связана с данным интервалом соотношением:

$$\Delta\omega = 2\pi \cdot c\Delta\bar{\nu} \qquad (3)$$

Подставим (3) в (2) и выразим момент инерции:

$$J = \frac{\hbar}{2\pi \cdot c\Delta\bar{\nu}} \qquad (4)$$

$$J = \frac{1{,}054 \cdot 10^{-34}\,Дж \cdot с}{2 \cdot 3{,}14 \cdot 3 \cdot 10^{8}\,м/с \cdot 29 \cdot 10^{2}\,м^{-1}} = 1{,}93 \cdot 10^{-47}\,кг \cdot м^{2} = 1{,}93 \cdot 10^{-40}\,г \cdot см^{2}$$

Найдем расстояние R между атомами молекулы CH, используя соотношение (4):

$$R = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi \cdot c\Delta\bar{\nu} \cdot \mu}} \qquad (5)$$

$$R = \sqrt{\frac{1{,}93 \cdot 10^{-47}\,кг \cdot м^{2}}{1{,}53 \cdot 10^{-27}\,кг}} = 112 \cdot 10^{-12}\,м = 112\,пм$$

Расстояние между атомами молекулы CH соответствует табличным данным.

Ответ: $J = 1{,}93 \cdot 10^{-40}\,г \cdot см^{2}$, $R = 112\,пм$

Задание №2. Найти для жесткой молекулы HCl квантовые числа l двух соседних вращательных уровней, разность энергий которых 7,86 мэВ.

Решение:

Энергия вращения жесткой двухатомной молекулы в состоянии с квантовым числом l имеет вид:

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} \qquad (1)$$

Для соседнего уровня с l+1 эта энергия определяется соотношением:

$$E_{l+1} = \frac{\hbar^2 (l+2)(l+1)}{2J} \qquad (2)$$

Разность энергий можно получить, используя (1) и (2):

$$\Delta E_{l+1,l} = E_{l+1} - E_l = \frac{\hbar^2 (l+2)(l+1)}{2J} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} \qquad (3)$$

$$\Delta E_{l+1,l} = \frac{\hbar^2 (l+1)}{J} \qquad (4)$$

Выразим из (4) квантовое число l:

$$l = \frac{\Delta E_{l+1,l} \cdot J}{\hbar^2} - 1 \qquad (5)$$

Момент инерции J найдем с помощью соотношения:

$$J = \mu R^2 \qquad (6),$$

где $\mu = \dfrac{m_{Cl} m_H}{m_H + m_{Cl}} = 1{,}61 \cdot 10^{-27}\ кг$ - приведенная масса молекулы HCl, $R = 1{,}275 \cdot 10^{-10}\ м$ - расстояние между атомами в молекуле.

Подставим (6) в (5) и получим:

$$l = \frac{\Delta E_{l+1,l} \cdot \mu R^2}{\hbar^2} - 1 \qquad (7)$$

Найдем значение квантовых чисел l, подставив значения соответствующих величин в (7):

$$l = \frac{7{,}86 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-22}\ Дж \cdot 1{,}61 \cdot 10^{-27}\ кг \cdot (1{,}275)^2 \cdot 10^{-20}\ м^2}{(1{,}054)^2 \cdot 10^{-68}\ Дж^2 \cdot с^2} - 1 = 2 \qquad (8)$$

$$l + 1 = \frac{\Delta E_{l+1,l} \cdot \mu R^2}{\hbar^2} = 2 + 1 = 3 \qquad (9)$$

Ответ: искомые соседние уровни это $l_1 = 2$ и $l_2 = 3$.

Варианты тестов итогового контроля по разделу: атомная физика

ТЕСТ № 1

1. В теории теплового излучения свет представляет собой _____.
2. Запишите закон Стефана - Больцмана _____.
3. Связь между объемной плотностью энергии и энергетической светимостью определяется соотношением _____.
4. Зависит ли комптоновское смещение от угла рассеяния рентгеновского излучения? Приведите для комптоновского смещения расчетную формулу.
5. Что доказали опыты Боте?
6. Какой эффект, известный в атомной физике, обусловлен дифракцией электронных волн на молекулах газа _____.
7. Связь между фазовой и групповой скоростями для волн де Бройля определяется соотношением _____.
8. Чьи опыты стали прямым экспериментальным доказательством дискретности атомных состояний?
9. В чем состоит сущность комбинационного принципа Ритца?
10. Какое соотношение соответствует второму постулату Бора?
11. Первый боровский радиус определяется соотношением _____.
12. Какова кратность вырождения уровней атома водорода?
13. Что представляет собой позитроний?
14. От каких квантовых чисел зависит энергия атомов щелочных металлов?
15. Как образуется резкая серия в спектрах атомов щелочных металлов?
16. Экспериментальные данные показывают, что для векторной модели атома, в большинстве случаев осуществляется _____ связь.
17. На каких принципах основано построение электронных оболочек атома?
18. Запишите электронную конфигурацию для кислорода $^{16}_{8}O$.
19. Назовите два типа химической связи.
20. Между какими энергетическими уровнями молекулы расстояние наименьшее?

ТЕСТ № 2

1. С ростом температуры максимум спектральной плотности энергии сдвигается в сторону _____.длин волн.
2. Излучение, которое возникает за счет внутренней (тепловой) энергии тела называют _____.
3. При каком условии формула планка переходит в формулу Вина для спектральной плотности энергии?
4. Внутренним эффектом в полупроводниках и диэлектриках называют _____.
5. Формула Эйнштейна для фотоэффекта имеет вид _____.
6. Условие Брэгга –Вульфа в случае дифракции рентгеновских волн на кристаллической решетке имеет вид _____.
7. Приведите уравнения де Бройля, связывающие волновые и корпускулярные свойства.
8. Как называется совокупность волн, волновые числа которых лежат в достаточно узком интервале?

9. Перечислите известные модели атомов.
10. Энергия стационарных состояний электронов в атоме определяется соотношением _____.
11. В чем причина изотопического сдвига спектральных линий?
12. Явление пространственного квантования магнитных моментов впервые наблюдалось в опытах _____.
13. Что представляет собой множитель Ланде? Каким соотношением он определяется?
14. Сформулируйте правило мультиплетности.
15. Чем эффект Зеемана отличается от эффекта Пашена – Бака с точки зрения векторной модели?
16. Запишите электронную конфигурацию для азота ${}^{14}_{7}N$.
17. Приведите закон Мозли для рентгеновских спектров.
18. Для чего применяется правило Хунда?
19. Сформулируйте принцип Паули.
20. Как называются молекулярные спектры? Какие виды спектров они могут содержать?

Примеры контрольных работ с ответами по разделу: атомная физика

I Вариант

1. Найти длину волны рентгеновского излучения, если максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов равна 0.19 МэВ.
2. Считая, что спектральное распределение энергии теплового излучения подчиняется формуле $u(\omega,t) = A\cdot\omega^3\cdot e^{\frac{-a\cdot\omega}{T}}$, где $a = 7.64$ пс*К, найти для температуры Т=2000К наиболее вероятную частоту излучения.
3. У какого водородоподобного иона разность длин волн между двумя головными линиями серий Бальмера и Лаймана равна 59.3нм.

II Вариант

1. Найти для водородоподобного иона радиус n – ой боровской орбиты и скорость электрона на ней. Вычислить эти величины для иона He^+.
2. Определить красную границу для цинка и максимальную скорость фотоэлектронов, вырываемых с его поверхности электромагнитным излучением с длиной волны 250 нм.
3. Считая, что спектральное распределение энергии теплового излучения подчиняется формуле $u(\omega,t) = A\cdot\omega^3\cdot e^{\frac{-a\cdot\omega}{T}}$, где $a = 7.64$ пс*К, найти для температуры Т=2000К наиболее вероятную длину волны излучения.

III Вариант

1. Длина волны, отвечающая максимуму испускательной способности абсолютно черного тела, рвана 3.4мкм. Найти его энергетическую светимость.
2. При поочередном освещении поверхности некоторого металла светом с длинами волн 0.35мкм и 0.54мкм обнаружили, что соответствующие максимальные

скорости фотоэлектронов отличаются друг от друга в $\eta = 2$ раза. Найти работу выхода с поверхности этого металла.
3. Вычислить для атомарного водорода длины волн первых трех линий серии Бальмера.

Приложение 1

Основные постоянные физические величины в атомной физике

Наименование постоянной величины	Значение в СИ	Значение в других системных единицах
Элементарный заряд	$e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Кл	$e = 4{,}8 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ
Масса покоя электрона	$m_e = 9{,}11 \cdot 10^{-31}$ кг	$m_e = 0{,}511$ МэВ
Удельный заряд электрона	$\frac{e}{m_e} = 1{,}76 \cdot 10^{11}$ Кл/кг	$\frac{e}{m_e} = 5{,}27 \cdot 10^{17}$ СГСЭ
Масса покоя протона	$m_p = 1{,}6726 \cdot 10^{-27}$ кг	$m_p = 938{,}28$ МэВ
Удельный заряд протона	$\frac{e}{m_p} = 0{,}959 \cdot 10^{8}$ Кл/кг	$\frac{e}{m_p} = 2{,}87 \cdot 10^{14}$ СГСЭ
Постоянная Стефана - Больцмана	$\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}$ Вт$/\left(K^4 \cdot м^2\right)$	$\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}$ эрг$/\left(K^4 \cdot см^2 \cdot с\right)$
Постоянная закона смещения Вина	$b = 2{,}9 \cdot 10^{-3}\ K \cdot м$	-
Постоянная Планка	$\hbar = 1{,}0546 \cdot 10^{-34}\ Дж \cdot с$	$\hbar = 0{,}6582 \cdot 10^{-15}\ эВ \cdot с$
Постоянная Ридберга	$R = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} = 2{,}067 \cdot 10^{16}\ с^{-1}$	$R' = \frac{R}{2\pi c} = 1{,}097 \cdot 10^{5}\ см^{-1}$
Первый боровский радиус	$r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-10}\ м$	$r_1 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-8}\ см$
Энергия связи электрона в атоме водорода	$E = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = 2{,}18 \cdot 10^{-18}$ Дж	$E = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 13{,}56$ эВ
Комптоновская длина волны электрона	$\lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} = 2{,}4 \cdot 10^{-12}\ м$	$\lambda'_C = \frac{\lambda_C}{2\pi} = 3{,}8 \cdot 10^{-11}\ см$
Магнетон Бора	$\mu_Б = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9{,}27 \cdot 10^{-27}\ A \cdot м^2$	$\mu_Б = 0{,}579 \cdot 10^{-4}$ эВ/Гс
Магнитный момент электрона	$\mu_e = 1{,}00116 \cdot \mu_Б$	-

Гиромагнитный множитель электрона	$g_e = 2{,}0022$	-
Электрическая постоянная	$\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}\ Ф/м$	-
Магнитная постоянная	$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}\ Гн/м$	-
Скорость света	$c = 2{,}998 \cdot 10^{8}\ м/с$	-

Соотношение между некоторыми единицами:

$1\,эВ = 1{,}6 \cdot 10^{-12}$ эрг	$1\,Вт = 10^{7}$ эрг/с	$1\,Тл = 10^{4}\,Гс$
$1\,Дж = 10^{7}$ эрг	$1\,Кл = 3 \cdot 10^{9}$ СГСЭ	$1\,Э = 10^{3}/4\pi\ А/м$
$1\,кал = 4{,}18\,Дж$	$1\,В = 1/300$ СГСЭ	$1\,Вб = 10^{8}\,Мкс$
$1\,а.е.м. = 1{,}66 \cdot 10^{-24}$ г	$1\,Ф = 9 \cdot 10^{11}\,см$	$1\,Гн = 10^{9}\,см$
$1\,а.е.м. = 931{,}5\,МэВ$	$1\,фм = 10^{-13}\,см$	$1\,год = 3{,}11 \cdot 10^{7}\ с$

Приложение 2

Некоторые специальные функции, описывающие состояние водородоподобных атомов в атомной (квантовой) физике.

Электрон в водородоподобном атоме движется в поле кулоновских сил ядра, которые являются центральными. Уравнение Шредингера в этом случае имеет вид:

$$\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = 0 \qquad (1)$$

где $\nabla^2 = \Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\cdot\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$ - оператор Лапласа в сферической системе координат (ССК), а $U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ - потенциальная энергия кулоновского взаимодействия ядра и электрона.

Благодаря тому, что в операторе Лапласа в ССК (1) можно выделить радиальную и сферическую части волновая функция водородоподобного атома может быть представлена в виде произведения радиальной $R(r)$ и сферической $Y(\theta,\varphi)$ функций:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot Y(\theta,\varphi) \qquad (2)$$

Подставляя (2) в (1) и поделив его на произведение $R(r)\cdot Y(\theta,\varphi)$ можно получить два уравнения:

1) для радиальной части

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right] - \frac{\lambda}{r^2}\right)R(r) = 0 \qquad (3)$$

Вид радиальной части волновой функции зависит от потенциальной энергии $U(r)$ в центральном поле сил для конкретной задачи.

2) для сферической части

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+\lambda Y=0 \qquad (4)$$

где $\lambda = l(l+1)$ - постоянное число, связанное с орбитальным моментом. Такое значение для параметра удовлетворяет требованию непрерывности и конечности сферической функции при всех углах θ.

Соотношение вида (4) является уравнением Лапласа, решением которого являются сферические функции. Они часто получаются при решении многих задач математической физики и квантовой механики. Решение дифференциального уравнения (4) известно и имеет вид:

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta) \qquad (5)$$

где $P_l^m(\cos\theta)$ - присоединенная функция Лежандра, а $m=-l,-l+1,...,l-1,l$, то есть при заданном орбитальном квантовом числе l магнитное число m может принимать $2\cdot l+1$ значений. Четность сферической функции зависит только от значения орбитального числа l. Это видно из (5) и (6).

Присоединенная функция Лежандра имеет вид:

$$P_l^m(\xi)=\frac{1}{2^l l!}\left(1-\xi^2\right)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}}\left(\xi^2-1\right)^l \qquad (6)$$

где $\xi=\cos\theta$.

Так как модуль шаровой функции не зависит от полярного угла φ, то распределение плотности вероятности местоположения электрона (электронного облака) является аксиально – симметричным. Это распределение можно изобразить на плоскости ZOX, откладывая $\left|P_l^m\right|$ по радиус вектору в направлении угла θ. Ниже приведены значения плотностей вероятностей в *s* и *p* состояниях:

$$\left|Y_0^0\right|^2=1/4\pi;$$

$$\left|Y_1^0\right|^2=(3/4\pi)\cos^2\theta;$$

$$\left|Y_1^1\right|^2=\left|Y_1^{-1}\right|^2=(3/8\pi)\sin^2\theta.$$

Для присоединенных полиномов Лежандра применяется следующее условие ортогональности:

$$\int_{-1}^{1}P_l^m(\xi)\cdot P_{l'}^m(\xi)d\xi=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{l,l'} \qquad (7)$$

где $\delta_{l,l'}=\begin{cases}1, & l=l'\\ 0, & l\neq l'\end{cases}$ - символ Кронекера.

Рекуррентное соотношение для присоединенных функций Лежандра, используемое для расчета разрешенных оптических переходов, имеет вид:

$$\left(1-\xi^2\right)P_l^m=(2l+1)^{-1}\left(P_{l+1}^{m+1}-P_{l-1}^{m+1}\right) \qquad (8)$$

Решая уравнение (3) с учетом кулоновского потенциала можно получить радиальную часть волновой функции водородоподобного атома:

$$R_{nl}(\rho)=\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{4}{(n-l-1)!(n+1)!}}e^{-\rho/2}\rho^l Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \qquad (9)$$

где $Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ - полиномы Лагерра; $a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$ - радиус первой боровской орбиты в атоме водорода; $\rho=\frac{2Zr}{na_0}$; Z – порядковый номер элемента водородоподобного атома.

Полиномы Лагерра являются решением уравнения вида:

$$\rho g''+[q+1-\rho]g'+sg=0 \qquad (10)$$

где $q=2l+1$, $s=k=n-l-1$ - радиальное квантовое число.

Эти полиномы могут иметь вид:

$$Q_k^{2l+1}(\rho)=e^{\rho}\rho^{-2l-1}\frac{d^k}{d\rho^k}\left(e^{-\rho}\rho^{2l+1+k}\right) \qquad (11)$$

(11) – формула Родрига для полинома Лагерра.

$$Q_k^{2l+1}(\rho)=(-1)^k\left(\rho^k-\frac{k(2l+1+k)}{1!}\rho^{k-1}+\frac{k(k-1)(2l+1+k)(2l+k)}{2!}\rho^{k-2}-\ldots\right) \qquad (12)$$

(12) - представление в виде ряда.

Для значений $k=0$ и $k=1$ обобщенные полиномы Лагерра имеют следующие значения:

$Q_0^{2l+1}(\rho)=1;$

$Q_1^{2l+1}(\rho)=1+(2l+1)-\rho$.

Полиномы Лагерра образуют ортогональную с весом $e^{-\rho}\rho^{2l+1}$ систему функций:

$$\int_0^{\infty}Q_k^{2l+1}(\rho)Q_{k'}^{2l+1}(\rho)e^{-\rho}\rho^{2l+1+k}d\rho=\begin{cases}0, & k\neq k' \ (2l+1>-1)\\ \dfrac{\Gamma(k+(2l+1)+1)}{k!}, & k=k'\end{cases} \qquad (14)$$

Приложение 3

Основные формулы векторного анализа и квантовомеханические операторы, применяемые при решении задач в атомной физике:

1. Оператор набла в декартовых координатах:

$$\nabla = \vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial z}$$

2. Формула градиента в декартовых координатах:

$$gradf(x,y,z) = \nabla f(x,y,z) = \vec{i}\,\frac{\partial f}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial f}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial f}{\partial z}$$

3. Формула градиента в цилиндрических координатах:

$$gradf(\rho,z,\varphi) = \nabla f(\rho,z,\varphi) = \vec{e}_\rho\,\frac{\partial f}{\partial \rho} + \vec{e}_\varphi\,\frac{1}{\rho}\frac{\partial f}{\partial \varphi} + \vec{e}_z\,\frac{\partial f}{\partial z}$$

4. Формула градиента в сферических координатах:

$$gradf(r,\theta,\varphi) = \nabla f(r,\theta,\varphi) = \vec{e}_r\,\frac{\partial f}{\partial r} + \vec{e}_\varphi\,\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \varphi} + \vec{e}_\theta\,\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}$$

где φ - полярный угол, а θ - азимутальный.

5. Градиент сложной функции:

$$gradU(f(x,y,z)) = \frac{\partial U}{\partial f}\,gradf$$

6. Полный дифференциал:

$$df(x,y,z) = \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy + \frac{\partial f}{\partial z}dz = gradf d\vec{r}$$

7. Формула дивергенции в декартовых координатах:

$$div\vec{a}(x,y,z) = (\nabla,\vec{a}) = \frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + \frac{\partial a_z}{\partial z}$$

8. Формула дивергенции в цилиндрических координатах:

$$div\vec{a}(\rho,z,\varphi) = \vec{e}_\rho\,\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}(\rho a_\rho) + \vec{e}_\varphi\,\frac{1}{\rho}\frac{\partial a_\varphi}{\partial \alpha} + \vec{e}_z\,\frac{\partial a_z}{\partial z}$$

9. Формула дивергенции в сферических координатах:

$$div\vec{a}(r,\theta,\varphi) = \vec{e}_r\,\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 a_r) + \vec{e}_\varphi\,\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial a_\varphi}{\partial \alpha} + \vec{e}_\theta\,\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\, a_\theta)$$

10. Дивергенция от произведения скалярной функции и вектора:

$$div(\vec{a}(x,y,z)\cdot f(x,y,z)) = (\nabla,(\vec{a}f)) = f div\vec{a} + \vec{a}gradf$$

11. Дивергенция сложной функции:

$$div(\vec{a}f(x,y,z)) = \frac{d\vec{a}}{df}\,gradf$$

12. Формула ротора в декартовых координатах:

$$rot\vec{a}(x,y,z) = [\nabla,\vec{a}] = \vec{i}\left(\frac{\partial a_z}{\partial y} - \frac{\partial a_y}{\partial z}\right) + \vec{j}\left(\frac{\partial a_x}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial x}\right) + \vec{k}\left(\frac{\partial a_y}{\partial x} - \frac{\partial a_x}{\partial y}\right)$$

13. Формула ротора в цилиндрических координатах:

$$rot\vec{a}(\rho, z, \varphi) = \vec{e}_\rho\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial a_z}{\partial\varphi} - \frac{\partial a_\varphi}{\partial z}\right) + \vec{e}_z\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial(\rho\, a_\varphi)}{\partial\rho} - \frac{\partial a_\rho}{\partial\varphi}\right) + \vec{e}_\varphi\left(\frac{\partial a_\rho}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial\rho}\right)$$

14. Формула ротора в сферических координатах:

$$rot\vec{a}(r, \theta, \varphi) = \vec{e}_r\frac{1}{r\sin\theta}\left(\frac{\partial(\sin\theta\, a_\varphi)}{\partial\theta} - \frac{\partial a_\theta}{\partial\varphi}\right) + \vec{e}_\theta\left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial a_r}{\partial\varphi} - \frac{1}{r}\frac{\partial(r a_\varphi)}{\partial r}\right)$$

$$+\vec{e}_\varphi\frac{1}{r}\left(\frac{\partial(r a_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial a_r}{\partial\theta}\right)$$

15. Ротор от произведения скалярной функции и вектора:

$$rot(\vec{a}(x, y, z)\cdot f(x, y, z)) = [\nabla, (\vec{a}f)] = f rot\vec{a} + [(grad f)\vec{a}]$$

16. Ротор сложной функции:

$$rot(\vec{a}f(x, y, z)) = -\left[\frac{d\vec{a}}{df}grad f\right]$$

17. Дивергенция градиента:

$$div\, grad f = (\nabla\nabla)f = \nabla^2 f = \Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - оператор Лапласа в декартовых координатах

18. Ротор градиента:

$$rot\, grad f = [\nabla\nabla]f = 0$$

19. Дивергенция ротора:

$$div\, rot\vec{a} = (\nabla[\nabla\vec{a}]) = 0$$

20. Ротор ротора:

$$rot\, rot\vec{a} = [\nabla[\nabla\vec{a}]] = \nabla(\nabla\vec{a}) - \Delta\vec{a} = grad\, div\vec{a} - \Delta\vec{a}$$

21. Оператор Лапласа в цилиндрических координатах:

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

22. Оператор Лапласа в сферических координатах:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

23. Теорема Остроградского – Гаусса:

$$\int_V div\vec{a}dV = \oint_S(\vec{a}d\vec{S})$$

24 Теорема Стокса:

$$\int_S rot\vec{a}d\vec{S} = \oint_l(\vec{a}d\vec{l})$$

25 Производная по времени от оператора $\hat{A}$:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}],$$

где $\left[\hat{H}, \hat{A}\right]$ - коммутатор операторов, а $\hat{H}$ - гамильтониан.

26 Коммутатор операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Операторы коммутируют, если их произведение не зависит от порядка сомножителей: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

27 Антикоммутатор операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

28 Основные квантовомеханические операторы:

1) проекция импульса: $\hat{p}_x = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$
2) квадрат импульса: $\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \Delta$
3) полная энергия (гамильтониан): $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + U = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$
4) проекции момента импульса: $\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$; $\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

5) Квадрат момента импульса: $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta,\varphi}$

Литература

1. А.Н. Матвеев. Атомная физика. М., Высшая школа, 1989..
2. Д.В. Сивухин. Общий курс физики. Т. 5. Атомная физика. М., Наука, 2007.
3. И.Е. Иродов. Задачи по общей физике. С.-Пб., Лань, 2001.
4. В.С. Волькенштейн. Сборник задач по физике. М., Просвещение, 1984.
5. И.В. Савельев. Сборник задач по физике. М., Просвещение, 1984.
6. И.В. Савельев. Курс общей физики. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. М., Наука, 1987.
7. А.А. Детлаф, Б.М. Яворский. Курс физики. М., Высшая школа, 2002.
8. В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. М., Наука, 1977.
9. А.И. Ансельм. Введение в физику полупроводников. М., Наука, 1973.
10. А.С. Давыдов. Квантовая механика. М., Наука, 1973.
11. А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. Уравнения математической физики. М., Наука, 1972.
12. А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров. Специальные функции математической физики. М., Наука, 1984.

Учебное-практическое издание

Брусенская Елена Ивановна
Хамидуллин Рустам Ангамович
Ляхомская Ксения Даниловна

Атомная физика
Методические рекомендации

Издаётся в авторской редакции

Подписано в печать 19 .06.2017 г.
Формат 60х84/16. Усл. печ. л. 5.
Заказ № 052. Тираж 30 экз.
Отпечатано с готового оригинал-макета
Типографией ООО «РВТ»
3200, г. Бендеры, ул. Московская, д. 30