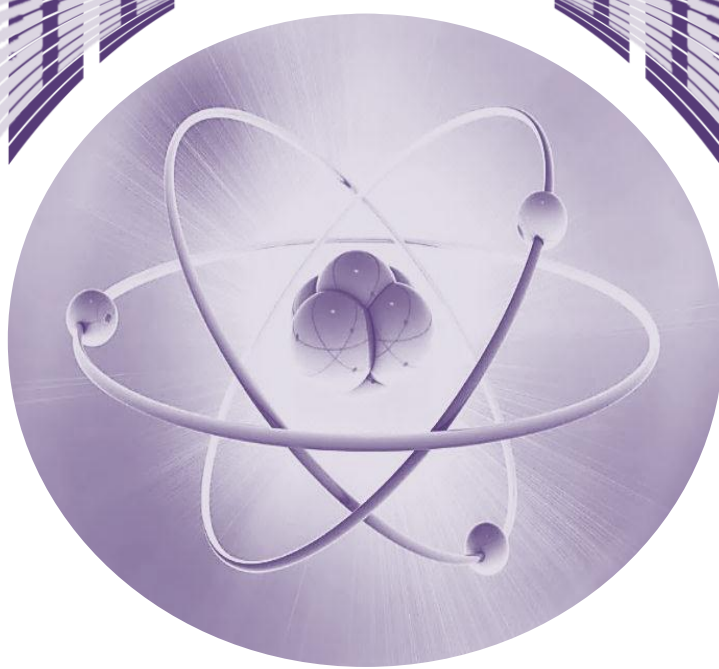
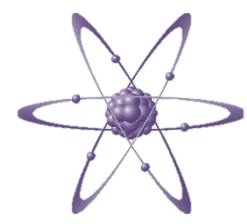


**ФИЗИКА АТОМА
И
АТОМНЫХ ЯВЛЕНИЙ**



МГТУ ИМ. И. П. ШАМКИНА

ISBN 978-985-477-832-7



9 789854 778327

Министерство образования Республики Беларусь

Учреждение образования
«Мозырский государственный педагогический университет
имени И. П. Шамякина»

ФИЗИКА АТОМА
И АТОМНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Справочник
для студентов специальности 1-31 04 08 03 «Компьютерная физика.
Компьютерное моделирование физических процессов»

Мозырь
МГПУ им. И. П. Шамякина
2022

УДК 539.18(078)
ББК 22.383я73
Ф48

Составитель

Г. В. Кулак, доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры физики и математики УО МГПУ им. И. П. Шамякина

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, член-корреспондент НАН Беларуси,
профессор кафедры оптики УО ГГУ им. Ф. Скорины

А. Н. Сердюков;

кандидат физико-математических наук, доцент, заместитель заведующего
центром диагностических систем Института физики НАН Беларусь

П. И. Ропот

Печатается по решению редакционно-издательского совета учреждения образования
«Мозырский государственный педагогический университет имени И. П. Шамякина»

Физика атома и атомных явлений : справ. для студентов специальности
Ф48 1-31 04 08 03 «Компьютерная физика. Компьютерное моделирование
физических процессов» / сост. Г. В. Кулак. – Мозырь : МГПУ
им. И. П. Шамякина, 2022. – 63 с.

ISBN 978-985-477-832-7.

Материал разработан в соответствии с учебной программой дисциплины «Физика атома
и атомных явлений» и содержит определения основных величин, единицы их измерения,
основные законы и формулы физики атома и атомных явлений.

Издание адресовано студентам специальности 1-31 04 08 03 «Компьютерная физика.
Компьютерное моделирование физических процессов».

УДК 539.18(078)
ББК 22.383.5я73

ISBN 978-985-477-832-7

© Кулак Г. В., составление, 2022
© УО МГПУ им. И. П. Шамякина, 2022

Оглавление

Предисловие.....	4
1. Эффект Комптона.....	5
2. Комбинационный принцип Ритца	7
3. Постулаты Бора	10
4. Опыт Франка и Герца.....	12
5. Фазовые волны вещества.....	15
6. Опыты Тартаковского и Томсона	18
7. Опыт Йёнсона по интерференции электронных волн	19
8. Плоские волны и волновые пакеты	20
9. Уравнение Шредингера	22
10. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме	25
11. Уровень Ферми электронов в металле	27
12. Линейный гармонический осциллятор	29
13. Потенциальный барьер	31
14. Приближённая теория квантования движения микрочастицы в центрально-симметричном поле атома водорода	34
15. Движение микрочастицы в центрально-симметричном поле кулоновского притяжения	36
16. Гиромагнитное отношение.....	38
17. Магнитный момент атома	40
18. Опыт Штерна и Герлаха	41
19. Опыт Эйнштейна и де Гааза.....	43
20. Спин электрона.....	45
21. Полный механический момент электрона в атоме	47
22. Периодическая система Д.И. Менделеева	48
23. Ионизационные потенциалы и другие свойства химических элементов от водорода (H) до натрия (Na)	51
24. Эффект Зеемана	53
25. Квантово-механическая теория излучения атома.....	55
26. Электронный парамагнитный резонанс.....	59
Список рекомендуемой литературы.....	61
Предметный указатель	62

Предисловие

Курс «Общая физика» играет большую роль в жизни современного общества при формировании социально значимых ориентаций человека, обеспечивает гармонизацию отношений человека с окружающим миром.

Важное место при изучении курса физики отводится формированию у студентов навыков, необходимых для решения физических задач.

Физика атома и атомных явлений – это раздел физики, изучающий строение и свойства атомов. Результаты исследований в области атомной физики служат основой понимания химической связи, оптических и туннельных явлений, процессов в плазме, нейтральных жидкостях, твёрдых телах (в т. ч. полупроводниках и наноматериалах). Целью данного раздела является ознакомление студентов с основными положениями физики атома и атомных явлений в соответствии с программой специальности 1-31 04 08 03 «Компьютерная физика. Компьютерное моделирование физических процессов». В результате изучения раздела «Физика атома и атомных явлений» студент должен знать: основные законы и закономерности атомных явлений, математическую запись законов, изучить экспериментальные и теоретические методы научного физического исследования.

Реализации поставленной цели может служить данный справочник, основное назначение которого – помочь студентам быстро найти или восстановить в памяти необходимые законы и формулы данного раздела. Издание содержит основные теоретические сведения по разделу «Физика атома и атомных явлений», включающие определения физических величин, единицы их измерения, основные законы физики атома, физические формулы, являющиеся математическим выражением физических законов. Для лучшего восприятия и запоминания материала выводы всех законов и закономерностей проиллюстрированы соответствующими рисунками. Для эффективной реализации самостоятельной работы студентов по подготовке к занятиям по дисциплине «Физика атома и атомных явлений» представлен список рекомендуемой литературы.

1. Эффект Комптона

Известно, что свет, имеющий длину волны λ , обладает импульсом

$$p = \frac{h}{\lambda},$$

где h – постоянная Планка.

При столкновении фотона со свободным электроном величину передаваемого импульса можно измерить. Этот процесс рассеяния фотона на свободном электроном был исследован Комптоном и называется эффектом Комптона. Введем величину, связывающую длину волны рассеянного фотона λ' , если известна длина волны λ падающего на электрон фотона. При этом имеется угол рассеяния θ между импульсом падающего фотона \vec{p} и импульсом рассеянного фотона \vec{p}' . Схема опыта по наблюдению эффекта Комптона имеет вид:

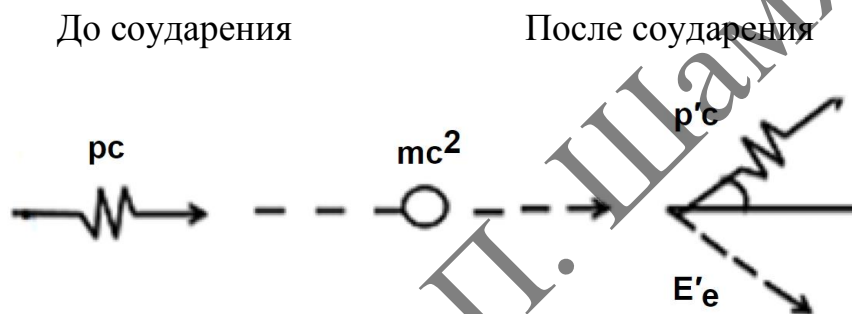


Рисунок 1 – Схематическое объяснение эффекта Комптона

Запишем закон сохранения энергии:

$$pc + mc^2 = p'c + E'_e, \quad (1.1)$$

где pc – кинетическая энергия фотона до соударения, $p'c$ – после соударения, mc^2 – энергия покоя электрона до соударения, E'_e – энергия, включающая энергию движения и покоя электрона после соударения. Тогда, возведя выражение (1.1) в квадрат, можно записать:

$$(p - p' + mc)^2 = \left(\frac{E'_e}{c}\right)^2. \quad (1.2)$$

Закон сохранения импульса следует записать в виде:

$$\vec{p} - \vec{p}' = \vec{p}'_e.$$

Возводя в квадрат, получим:

$$p^2 + p'^2 - 2pp'\cos\theta = p_e'^2,$$

$$(\vec{p}\vec{p}') = pp'\cos\theta. \quad (1.3)$$

Возведем левую часть (1.2) в квадрат, тогда получим:

$$\begin{aligned} (p - p')^2 + 2mc(p - p') + m^2 c^2 &= p^2 + p'^2 - 2pp' + 2mc(p - p') + m^2 c^2 = \\ &= \left(\frac{E_e'}{c} \right)^2 = \frac{(mc^2)^2}{c^2} + \frac{(p'_e c)^2}{c^2}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Вычтем равенство (1.4) из (1.3), тогда получим:

$$-2pp' + 2pp' \cos \theta + 2mc(p - p') = 0,$$

$$p' = \frac{p}{1 + \frac{p}{mc}(1 - \cos \theta)}.$$

Учтем, что $p = h/\lambda$, $p' = h/\lambda'$, тогда получим:

$$\frac{h}{\lambda'} = \frac{\frac{h}{\lambda}}{1 + \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)}, \quad \frac{1}{\lambda'} = \frac{1}{\lambda + \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)}.$$

Длину волны рассеянного света находим из соотношения:

$$\lambda' = \lambda + \lambda_c(1 - \cos \theta). \quad (1.5)$$

$\lambda_c = \frac{h}{mc}$ – длина волны Комптона. Из выражения (1.5) следует, что при рассеянии света на заряженной частице длина волны рассеянного света увеличивается (эффект Комптона).

2. Комбинационный принцип Ритца

Нагретые до большой температуры твёрдые тела имеют сплошной спектр излучения. У газов (наряду с областью сплошного спектра) наблюдаются линейчатые и полосатые спектры. Линейчатый спектр состоит из ряда закономерно расположенных узких линий. В полосатом спектре полосы кажутся сплошными в спектрографе малой разрешающей силы. При применении аппарата с большой разрешающей способностью они распадаются на множество тесно расположенных спектральных линий.

К началу XX века было выяснено, что линейчатые спектры газов испускаются атомами и ионами, а полосатые – молекулами вещества. Поэтому их называют атомными и молекулярными соответственно. Атомный спектр водорода удаётся наблюдать при электрическом разряде в вакуумной водородной трубке только тогда, когда большая часть молекул водорода (H_2) диссоциирует на атомы (H). Однако в парах йода (I_2) полосы молекулярного спектра исчезают значительно медленнее при распаде (I_2) на I+I.

Наличие многих спектральных линий атома указывает на сложность его внутренней структуры. Именно поэтому богатый экспериментальный материал, накопленный и началу XX века, послужил фундаментом, на котором строилась теория строения атома.

Положение спектральной линии в спектре характеризуется длиной волны λ или частотой $\nu = c/\lambda$. Частота более удобна для выяснения спектральных закономерностей, но для её определения необходимо знать скорость света c , а она измерена с недостаточной точностью. Длина же волны λ измеряется спектральными аппаратами с высокой точностью – до седьмого знака после запятой (и выше). Поэтому вместо частоты (ν), употребляют величину $\bar{\nu} = 1/\lambda$, называемую спектроскопическим волновым числом. Это есть число волн, укладывающихся на расстоянии (в вакууме) 1 м длины.

Основным законом спектроскопии, установленным в 1908 г., является комбинационный принцип Ритца. Сущность принципа состоит в том, что многообразие спектральных линий рассматриваемого атома может быть рассмотрено путём парных комбинаций гораздо меньшего числа спектральных линий, называемых **спектральными термами** (или термами). Частота $\bar{\nu}$ (волновое число) для каждой спектральной линии выражается разностью термов, т. е.

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = T_{n_1} - T_{n_2}. \quad (2.1)$$

Термы являются положительными величинами. Их нумеруют так, чтобы с возрастанием номера терма его величина уменьшалась. Тогда, если $n_1 < n_2$, то $T_{n_1} > T_{n_2}$.

Если фиксировать n_1 и придавать n_2 всевозможные возрастающие значения, начиная с $n_2 = n_1 + 1$, получится система линий, называемая спектральной серией. Совокупность спектральных серий составляет спектр рассматриваемого атома.

Пусть имеются две спектральные линии одной и той же серии, тогда выполняются соотношения:

$$\bar{\nu}_{12} = T_{n_1} - T_{n_2}, \quad \bar{\nu}_{13} = T_{n_1} - T_{n_3}, \quad \dots$$

Предполагаем, что $\bar{\nu}_{12} > \bar{\nu}_{13}$ (следовательно $n_2 > n_3$). Тогда, вычтя из первого равенства второе, получим: $\bar{\nu}_{12} - \bar{\nu}_{13} = T_{n_3} - T_{n_1}$. То есть полученная величина есть волновое число какой-то линии того же элемента, принадлежащей серии с начальным термом T_{n_3} . Таким образом, из комбинационного принципа следует, что разность частот (волновых чисел) двух спектральных линий одной и той же серии атома даёт частоту (волновое число) спектральной линии какой-то другой серии того же атома. Следует отметить, что такой линии может не оказаться в спектре. Это связано с тем, что на комбинацию термов друг с другом накладываются некоторые ограничения, называемые правилами отбора. Их суть устанавливается квантовой теорией атома.

Аналитические выражения для термов подавляющего большинства химических элементов не известны. Во многих случаях они представляются приближёнными эмпирическими или полуэмпирическими формулами. Например, для атомов щелочных металлов можно составить приближённые формулы, похожие по виду на термы атома водорода или водородоподобного иона. Для атома водорода терм с высокой точностью выражается формулой

$$T_n = \frac{R_H}{n^2}, \quad (2.2)$$

где $n=1,2,3,\dots$; R_H – постоянная Ридберга для атома водорода, то есть $R_H=10967876 \text{ м}^{-1}$. Аналогичное выражение справедливо для всех изотопов водорода (дейтерий, тритий) и всех одноэлектронных ионов. Например, серии Лаймана, Бальмера, Пашена, Брэккета и Пфунда подчиняются следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} \bar{\nu} &= R_H \left(1 - \frac{1}{n^2} \right), n = 2, 3, \dots; \\ \bar{\nu} &= R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, \dots; \\ \bar{\nu} &= R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 4, 5, \dots; \\ \bar{\nu} &= R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 5, 6, \dots; \\ \bar{\nu} &= R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 6, 7, \dots; \end{aligned} \quad (2.3)$$

Максимальная длина волны получается для серии Лаймана при $n=2$. Она равна $\lambda = \frac{4}{3R_H} = 121,56713 \text{ нм}$. Соответствующая линия называется резонансной

линией атома водорода. Максимальная частота $\bar{\nu}$ (волновое число) находится по формулам (2.3) при $n=\infty$. Эта частота называется границей серии. Для серии Бальмера, например, граница серии равна

$$\bar{\nu}_\infty = \frac{R_H}{4} = 2741969 \text{ м}^{-1}, \quad \lambda_\infty = \frac{4}{R_H} = 364,70142 \text{ нм}.$$

При приближении к границе серии спектральные линии сгущаются, то есть разность длин волн между ними асимптотически стремится к нулю в соответствии со схемой на рисунке 2.

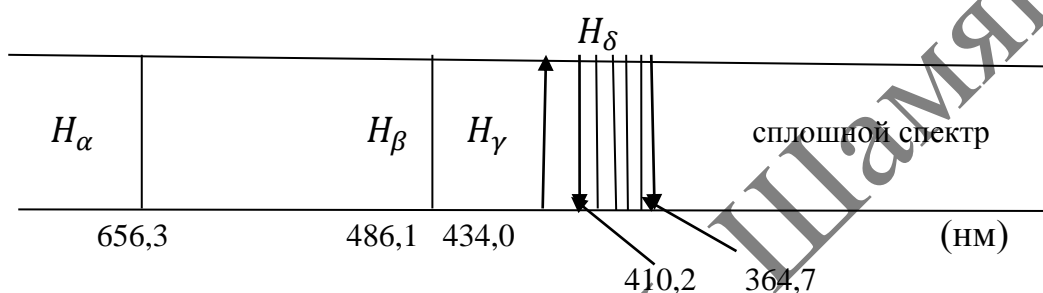


Рисунок 2 – Схематическое расположение спектральной серии Бальмера атома водорода

За границей серии спектр не обрывается, а становится сплошным. Эта закономерность проявляется в спектральных сериях не только водорода, но и других химических элементов.

3. Постулаты Бора

Законы классической физики, по их сути, приспособлены для описания непрерывных физических процессов. Однако резкость спектральных линий, испускаемых атомами химических элементов, указывает на то, что процессам внутри атомов свойственна прерывистость или дискретность. В связи с этим Н. Бор сформулировал два постулата.

1) Атом (и всякая атомная система) может находиться не во всех состояниях, допускаемых классической механикой, а только в некоторых избранных (квантовых) состояниях, характеризующихся определёнными дискретными значениями энергии W_1, W_2, \dots . В этих состояниях (вопреки классической электродинамике) атомы не излучают. Поэтому они называются стационарными состояниями.

Впоследствии квантовая механика, пришедшая на смену теории Бора, «автоматически» привела к стационарным состояниям и дискретным энергетическим спектрам атомов. Квантовая механика допускает и состояния непрерывного спектра энергии. Однако в этом случае электроны и ядра не образуют связную систему. При этом некоторые из них движутся инфинитно. В атомах же и молекулах составляющие их частицы связаны, то есть движутся финитно. В этих случаях энергетические уровни дискретны в соответствии с постулатами Бора. Н. Бор в своей теории полагал, что движение частиц в атомах происходит по некоторым траекториям, которым соответствуют некоторые скорости частиц. Квантовая же механика отвергает понятие траектории, по которой движется микрочастица.

2) При переходе из стационарного состояния с большей энергией W_{n_2} в стационарное состояние с меньшей энергией W_{n_1} , энергия атома изменяется на $W_{n_2} - W_{n_1}$. Если такое изменение происходит из-за излучения, то при этом испускается фотон с энергией

$$\hbar\omega = W_{n_2} - W_{n_1}. \quad (3.1)$$

Такое же соотношение справедливо и для поглощения фотона. При этом падающий фотон переводит атом с низшего энергетического уровня на более высокий уровень.

Таким образом, атомная система переходит из одного состояния в другое скачками, называемыми квантовыми. Однако на вопрос о том, что происходит во время скачка, теория Бора не отвечает. В этом её недостаток.

При больших интенсивностях света, реализуемых в импульсных лазерах, возможны многофотонные процессы испускания или поглощения света. При этом переход микрочастицы (электрона) с одного уровня на другой сопровождается испусканием или поглощением нескольких световых квантов. Такие процессы являются нелинейными. Возможны также переходы и без излучения, когда переход с одного уровня на другой сопровождается поглощением или выделением тепла.

Правило частот Бора объясняет комбинационный принцип Ритца. Из него для спектроскопического числа $\bar{\nu}$ получаем:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = (W_{n_2} - W_{n_1}) / hc. \quad (3.2)$$

Тогда выражение для терма T_n :

$$T_n = -\frac{W_n}{ch}. \quad (3.3)$$

(раздел 2).

Таким образом, спектральный терм определяется энергетическим уровнем атомной системы. Определенные (дискретные) значения энергии атома W_1, W_2, \dots называются квантованием энергии атома. Бор предложил правило квантования для атома водорода и водородоподобного иона, дающее правильные результаты, то есть

$$T_n = \frac{Z^2 R}{n^2}, \quad W_n = -chT_n = \frac{-chZ^2 R}{n^2}, \quad (3.4)$$

где R – постоянная Ридберга,

n – главное квантовое число.

С возрастанием квантового числа n соседние уровни сближаются и при $n \rightarrow \infty$ расстояние между ними $\Delta W \rightarrow 0$. В таком предельном случае квантовая система ведёт себя как классическая. Это положение в физике называется принципом соответствия.

Бор положил, что движение электрона происходит по окружности. Позднее Зоммерфельд обобщил предположения Бора о круговых орбитах на эллиптические орбиты. Однако с появлением квантовой механики данное обобщение потеряло смысл. Ранее нами была получена формула для энергетического спектра атома водорода или водородоподобного иона вида:

$$W_n = -\frac{me^4 Z^2}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}. \quad (3.5)$$

Сравнивая формулы (3.4) и (3.5), получаем выражение для постоянной Ридберга:

$$R = \frac{me^4}{64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^3 c} = 10973730,9 \pm 0,1 m^{-1}. \quad (3.6)$$

4. Опыт Франка и Герца

При столкновении с атомами заряженных частиц в электрическом поле последние могли переходить в возбужденные состояния, каждое из которых характеризуется определенным значением энергии. Если энергетические уровни атома дискретны, как утверждает первый постулат Бора, то кинетическая энергия электрона должна быть не меньше некоторой минимальной энергии для того, чтобы они начали возбуждать атомы газа. Такой метод возбуждения особенно пригоден для инертных газов и паров металлов, так как атомы этих веществ не обладают сродством к электрону, то есть не проявляют «склонности» к захвату электронов и образованию отрицательных ионов. В своих опытах Франк и Герц использовали пары ртути.

Схема опыта Франка и Герца приведена на рисунке 3.

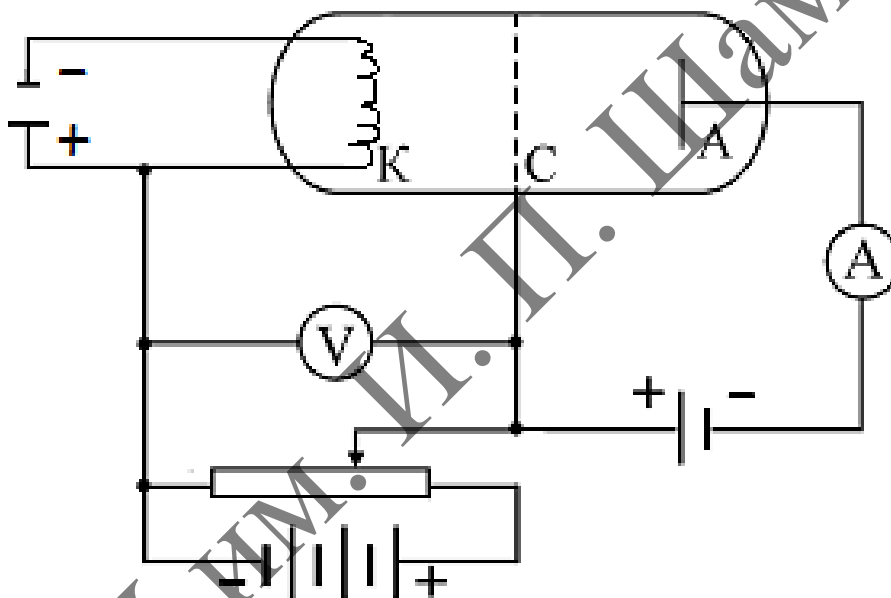


Рисунок 3 – Схема опыта Франка и Герца

В трубке, заполненной парами ртути под небольшим давлением (~ 1 мм.рт.ст.), имелись три электрода: катод (К), сетка (С) и анод (А). Электроны ускорялись разностью потенциалов U , приложенной между катодом и сеткой. Эту разность потенциалов плавно изменяли потенциометром. Между сеткой и анодом создавали слабое электрическое поле (разность потенциалов $\sim 0,5$ В), тормозившее движение электронов к аноду. На рисунке 4 показано изменение потенциальной энергии электрона $E_p = -e\phi$ в зазоре между электродами при различных значениях напряжения V между катодом и сеткой. Сила тока измерялась амперметром (А), напряжение измерялось вольтметром (V). Полученные результаты представлены на рисунке 4б.

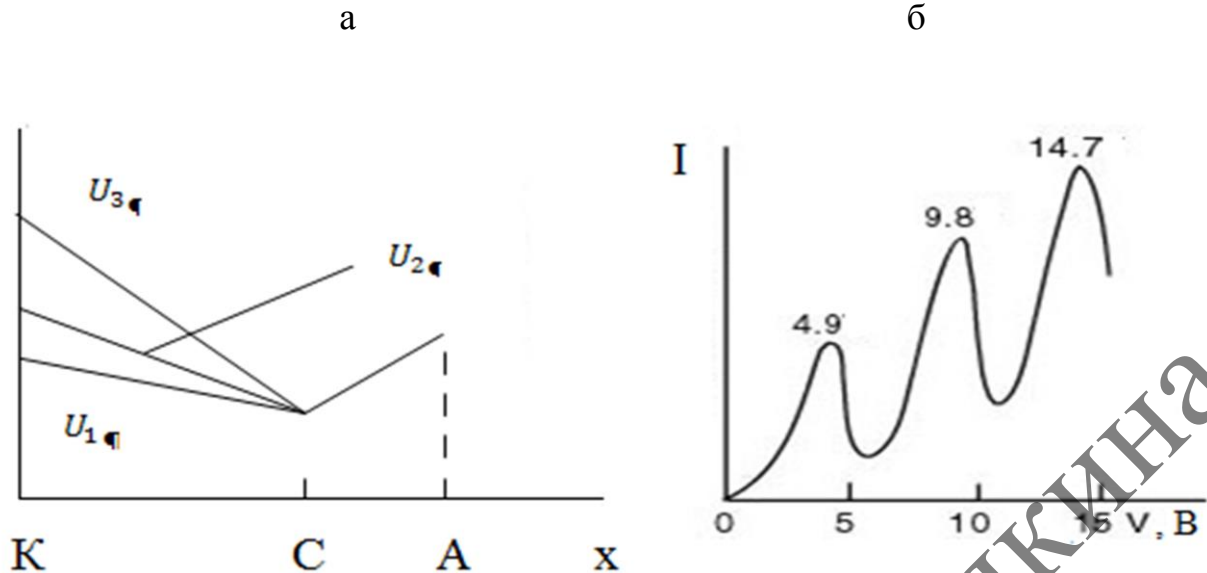


Рисунок 4 – Изменение потенциальной энергии электрона в зазоре между электродами (а) и зависимость силы тока I от напряжения V между анодом и катодом (б)

Видно (рисунок 4б), что сила тока вначале монотонно растет, достигая максимального значения при $V=4,9$ В, после чего с дальнейшим увеличением V резко падает, достигая минимума, и затем снова начинает расти. Максимумы силы тока повторяются при $V=9,8$ В, $14,7$ В и т. д. Такой ход кривой объясняется тем, что вследствие дискретности энергетических уровней атомы могут «воспринимать» энергию только лишь отдельными порциями определенной величины: $\Delta W_1 = W_2 - W_1$, $\Delta W_2 = W_3 - W_2$, $\Delta W_3 = W_4 - W_3$ и т. д., где W_1, W_2, W_3, \dots – энергия 1-го, 2-го, 3-го и т. д. стационарного состояния. До тех пор пока энергия электрона $E_p < \Delta W$, соударения между электронами и атомами ртути носят упругий характер, причем, поскольку масса электрона во много раз меньше массы атома ртути, энергия электрона при столкновениях практически не изменяется. Часть электронов попадает на сетку, остальные же, проскочив через сетку, достигают анода, создавая ток в цепи амперметра (А). Чем больше электронов попадает на сетку (чем больше V), тем больше будет доля электронов, проскочивших через сетку и, следовательно, больше ток I . Когда энергия, накапливаемая электроном в промежутке катод-сетка, достигает значения ΔW_1 , он продолжает затем двигаться с меньшей скоростью, испытав неупругий удар с атомом ртути. Поэтому число электронов, достигающих анода, уменьшается. Например, при $V=5,3$ В электрон сообщает атому энергию, соответствующую $4,9$ В (первый потенциал возбуждения атома) и продолжает двигаться с энергией $0,4$ эВ. Если даже такой электрон окажется между сеткой и анодом, то он не сможет преодолеть задерживающее напряжение $0,5$ В и будет возвращен обратно на сетку. Атомы, получившие при соударениях с электронами энергию ΔW_1 , переходят в возбужденное состояние, из которого они спустя время $\sim 10^{-8}$ с возвращаются в основное состояние и излучают фотон с частотой $\omega_1 = \Delta W_1 / \hbar$.

При напряжении, превышающем 9,8 В (~10 В), электрон на промежутке: катод-сетка может дважды претерпеть неупругие соударения с атомом ртути, теряя при этом энергию 9,8 эВ. Вследствие этого сила тока I снова начинает уменьшаться. При еще большем напряжении возможны трехкратные неупругие соударения с атомами ртути, что приводит к возникновению максимума при $V=14,7$ В и т. д. Очевидно, что атом, получивший при соударении энергию $\Delta W_2, \Delta W_3, \dots$, излучает свет с частотами: $\omega_2=\Delta W_2/\hbar, \omega_3=\Delta W_3/\hbar, \dots$. Таким образом, в опытах Франка и Герца нашли подтверждение и первый, и второй постулаты Бора.

МГТУ им. И. П. Шамякина

5. Фазовые волны вещества

Ко времени открытия волновых свойств микрочастиц была установлена двойственная природа света. В одних опытах (интерференция, дифракция) свет ведет себя как волна, а в других (поглощение, излучение, эффект Комптона) свет проявляет свойства частиц. Де-Бройль, по аналогии со светом, поставил вопрос о волновых свойствах других микрочастиц.

С частицей, движущейся в свободном пространстве с постоянной скоростью v , связана какая-то монохроматическая волна

$$\psi = \psi_0 e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}, \quad (5.1)$$

где ψ_0 – амплитуда волны,

ω – частота,

$|\vec{k}|$ – волновое число.

Выражение (5.1) будет релятивистски инвариантным при преобразовании координат и времени, если энергия и частота, а также импульс и волновое число микрочастицы связаны соотношениями:

$$W = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (5.2)$$

где \hbar – постоянная Планка, применявшаяся ранее для фотонов.

Из второго соотношения (5.2) следует длина волны де-Бройля, то есть

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}. \quad (5.3)$$

Эта волна (де-Бройля) в любой инерциальной системе отсчета определена однозначно.

При дифракции электронных волн на двух щелях используется электронная пушка, система управления скоростью электронов, две щели и система регистрации интерференционной картины. В природе никогда не наблюдается половина или часть электрона. Независимо от того, находится ли детектор за щелью А или В, электрон всегда обнаруживается целиком. В этом состоит сущность атомизма, справедливого для всех элементарных частиц, включая фотоны (рисунок 5).

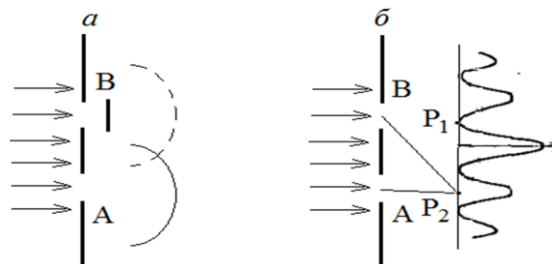


Рисунок 5 – Схема дифракции микрочастиц на двух щелях

С точки зрения волновой теории, мы приходим к выводу о том, что отдельный электрон может пройти лишь через одну из щелей A или B . Следовательно распределение электронов на экране должно быть суммой распределений от каждой щели в отдельности. Однако такое распределение на опыте не имеет места (рисунок 5б).

При этом, когда открыты две щели, счётчик перестает регистрировать электроны в точке P_1 . Это означает, что точка P_1 попадает в интерференционный минимум ($r_2 - r_1 = \lambda/2$). Если вначале открыть щель A , а затем постепенно открывать щель B , то количество отсчетов счётчика Гейгера, поставленного в точке P_1 , должно по классической физике увеличиваться от 100 до 200. На самом деле, число отсчетов снижается до нуля. Более того, если счётчик поместить в точку P_2 , то скорость счета по мере открывания щели B увеличится не от 100 до 200, а от 100 до 400.

Единственный способ устранить данное противоречие — создание математического формализма, правильно объясняющего наблюдаемое интерференционное явление. При этом следует построить внутренне непротиворечивую теорию.

Математический формализм, с помощью которого устраняется данное противоречие, ставит в соответствие каждой частице амплитуду вероятности $\psi(x, y, z, t)$, представляющую собой функцию координат и времени. Вероятность обнаружить частицу в произвольный момент времени t в любой точке (x, y, z) пропорциональна $|\psi(x, y, z, t)|^2$, то есть интенсивности потока частиц. Квадрат модуля используют потому, что $\psi(x, y, z, t)$ — комплексная функция. Формально она обладает свойством классической волны, поэтому ее часто называют волновой функцией.

Если событие можно произвести несколькими взаимно исключаящими способами (как, например, при прохождении через одну из щелей A или B), то амплитуда вероятности этого события представляет сумму амплитуд каждого события и равна:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2. \quad (5.4)$$

Формула (5.4) выражает принцип суперпозиции. Это положение аналогично правилу сложения волн в оптике. В рассмотренном примере ψ_1 описывает волну, проходящую через щель A , а ψ_2 — через щель B . На экране обе волновые функции перекрываются и дают классическую интерференционную картинку (рисунок 5б). Направление на n -й максимум находим по формуле: $\sin \theta_n = n\lambda / d$. Механизма формирования интерференционной картины при наложении волн-частиц создать не удалось.

Интерференция электронных волн-частиц является необычным явлением. Оно наблюдается, даже если мы посылаем из источника один электрон. Тогда, согласно волновым представлениям, каждому электрону соответствует цуг волн или волновой пакет, расщепляющийся поровну между двумя щелями.

Однако, поместив за щелью A счётчика Гейгера, камеру Вильсона или любой другой детектор частиц, мы увидим, что через щель никогда не проходит половина электрона. В этом сущность атомизма, который совместим с гипотезой о том, что интенсивность волны за щелью A характеризует вероятность найти электрон (целиком) в том же месте пространства.

Более того, если детектор пометить за щелью A , то интерференционная картина сгладится и получится классический результат. Наличие детектора изменяет ожидаемый результат, превращая интерференционную картину (рисунок 5б) в классическую (рисунок 5а). Таким образом, не нарушая интерференционной картины, невозможно обнаружить через какую щель прошла частица.

Если механические волны распространяются в среде, в которой колеблются ее частицы, то электромагнитные волны могут распространяться и в вакууме («колеблются» напряженности электрического и магнитного полей). Волновая функция не является непосредственно наблюдаемой величиной, и в этом смысле ничто не совершает колебательного движения. Непонаблюдаемой является частота электронной частицы-волны.

МГТУ им. И. П. Шамурдина

6. Опыты Тартаковского и Томсона

Если волна-частица распространяется в трёхмерной системе координат XYZ, то уравнение плоской волны де-Бройля имеет вид:

$$\psi = Ae^{i(\omega t - k_x x - k_y y - k_z z)}. \quad (6.1)$$

Используя соотношения

$$\omega = \frac{W}{\hbar}, k_x = \frac{P_x}{\hbar}, k_y = \frac{P_y}{\hbar}, k_z = \frac{P_z}{\hbar} \quad (6.2)$$

и подставив их в (6.1), получим следующее выражение для плоской электронной волны-частицы

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Wt - P_x x - P_y y - P_z z)}. \quad (6.3)$$

Аналогично тому, как развивалась теория света в разделе «волновая оптика», развивалась и волновая теория волн-частиц. Физический смысл в квантовой теории имеет квадрат абсолютной величины волновой функции, то есть

$$\psi\psi^* = |\psi|^2. \quad (6.4)$$

Дальнейшее развитие квантовой теории показало, что величина $|\psi|^2$ пропорциональна плотности вероятности обнаружения микрочастицы в заданной области пространства. Развитие квантовой теории атома потребовало существенных изменений в механике поведения микро частиц вещества: электронов, протонов, атомов, молекул и др. Убедительные опыты, позволившие доказать волновую природу микрочастиц, были поставлены Дэвиссоном и Джермером по дифракции электронов в режиме отражения и Томсоном и Тартаковским в режиме пропускания на кристаллической решетке вещества. Дифракция на отверстиях, атомных линиях и кристаллах представлена на рисунке 6.

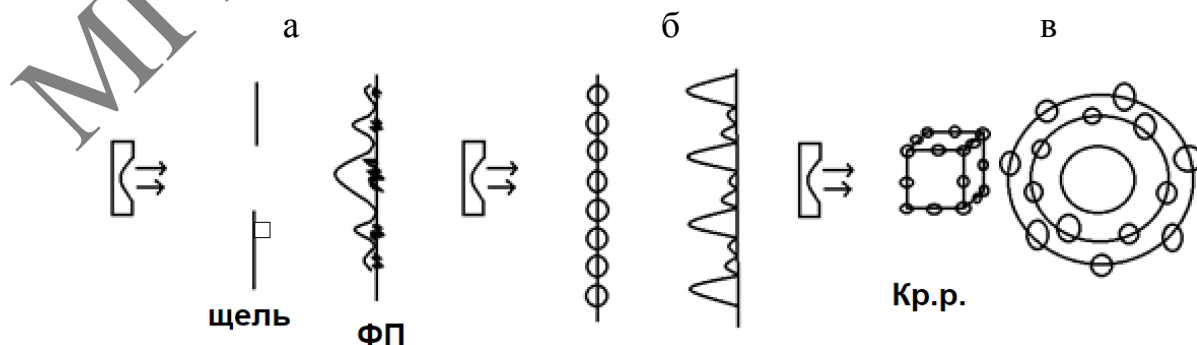


Рисунок 6 – Дифракция электронов на щели (а), атомной линии (б), кристаллической решетке (в)

7. Опыт Иёнсона по интерференции электронных волн

Иёнсон наблюдал интерференцию электронных волн на двух щелях. Схема опыта имеет вид:



Рисунок 7 – Схема опыта Иёнсона

Для электронов, ускоренных разностью потенциалов U , импульс микро-частицы определяется из соотношений:

$$\frac{m_e v^2}{2} = eU, v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}, p = \sqrt{2m_e eU}. \quad (7.1)$$

Поэтому длина волны находится из соотношения

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}} = \frac{1,2264}{\sqrt{U(B)}} \text{ (нм)}. \quad (7.2)$$

Для протонов

$$\lambda_p = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_p eU}} = \frac{0,02862}{\sqrt{U(B)}} \text{ (нм)}. \quad (7.3)$$

Из вышеприведенных формул следует, что для электронов и протонов, ускоренных в электрическом поле с потенциалом 100–40000 В, их длины волн того же порядка, что и длины волн рентгеновских лучей. Поэтому приемники в опытах Иёнсона должны соответствовать рентгеновским лучам. В опытах Иёнсона, при изменении длины волны излучения, расположение максимумов и минимумов в интерференционной картине (см. предыдущий раздел) изменялось.

8. Плоские волны и волновые пакеты

Особенностью волновой механики является комплексность волновой функции плоской волны. Если в качестве волновой функции взять $\psi = A \cos(kx - \omega t)$, то распределение вероятности будет $\psi^2 = A^2 \cos^2(kx - \omega t)$. При этом в пространстве и времени нашлись бы области, где $\psi^2 = 0$, тогда как по определению плоской волны для частицы-волны ее можно обнаружить в любой точке пространства. Такому условию удовлетворяет комплексная волновая функция $\psi = A \exp[i(k_0 x - \omega t)]$. Тогда $|\psi|^2 = A^2$ – равномерное распределение вероятности по оси X . По формуле Эйлера, $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$, поэтому мнимая и действительная части ψ являются монохроматическими волнами:

$$\operatorname{Re}(\psi) = \cos(k_0 x - \omega t), \operatorname{Im}(\psi) = \sin(k_0 x - \omega t).$$

Таким образом, если импульс частицы точно задан, т. е. $k_0 = \hbar^{-1} p = \text{const}$, то мы ничего не знаем о ее местоположении ($|A|^2 = \text{const}$). Однако в большинстве физических ситуаций известно то, что частицы находятся в определенной области пространства и имеют некоторый импульс. Рассмотрим, например, следующую волновую функцию в момент времени $t = 0$:

$$\psi(x, t=0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x), \quad (8.1)$$

плотность вероятности обнаружения микрочастицы

$$\rho(x) = |\psi|^2 = A^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right). \quad (8.2)$$

Графики действительной части волновой функции (8.1) и функции (8.2) имеют вид (рисунок 8):

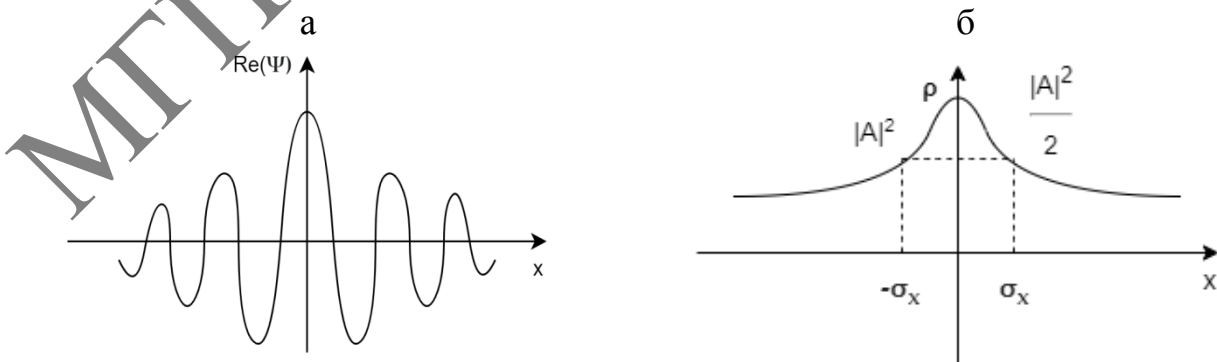


Рисунок 8 – Зависимость действительной части волновой функции (а) и плотности вероятности обнаружения микрочастицы (б) от координаты x

Из рисунка 8б следует, что более чем в 50 % случаев частица может быть обнаружена в интервале: $x = -\sigma_x, x = \sigma_x$. Функция $\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right)$ представляет

собой известное распределение Гаусса, причем σ_x – среднеквадратичное отклонение, которое будем называть неопределенностью координаты x и обозначать как: Δx . Такая локализованная волна называется волновым пакетом. Волну (8.1) можно представить в виде совокупности плоских монохроматических волн, то есть

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} B_n \exp(ik_n x). \quad (8.3)$$

В последнем выражении содержится бесконечное число плоских волн, поэтому его можно записать как

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \int B(k) \exp(ikx) dk. \quad (8.4)$$

Далее воспользуемся математическим тождеством:

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = A \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \int \exp\left[-\sigma_x^2 (k - k_0)^2\right] \exp(ikx) dk. \quad (8.5)$$

Сравнивая формулу (8.4) и (8.5), получаем:

$$B(k) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\sigma_x^2 (k - k_0)^2\right]. \quad (8.6)$$

Заметив, что $k = \hbar p, k_0 = \hbar p_0$, получим коэффициент разложения Фурье ψ – функции по импульсам, то есть

$$B(p) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(p - p_0)^2}{(\hbar / \sigma_x)^2}\right]. \quad (8.7)$$

Таким образом, $\sigma_p = \hbar / 2\sigma_x$. В случае волновой функции в виде распределения Гаусса выполняется соотношение, называемое соотношением неопределенности

$$\sigma_x \sigma_p = \hbar / 2. \quad (8.8)$$

Для всех других распределений неопределенность при определении координаты (Δx) и импульса (Δp) связана соотношением неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar / 2. \quad (8.9)$$

То есть, чем точнее известно местоположение частицы, тем менее точно известен ее импульс. Соотношение (8.8) является частным случаем соотношения (8.9).

9. Уравнение Шредингера

Уравнение, которому подчиняется волновая функция, называется волновым уравнением квантовой механики Шредингера. Это общее уравнение, пригодное для решения всех, а не только частных задач. Это уравнение линейно и однородно по волновой функции ψ . Этим обеспечивается справедливость принципа суперпозиции волновых функций, необходимость которого диктуется интерференцией и дифракцией волн вещества. При наличии потенциальных силовых полей $U(\vec{r}) \neq 0$ получаем уравнения Шредингера в общем виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\vec{r}) \psi. \quad (9.1)$$

Уравнение Шредингера (1) часто записывают в операторном виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (9.2)$$

где $\hat{H} = \hat{K} + \hat{P} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r)$ – оператор гамильтона, причем \hat{K} – оператор кинетической энергии микрочастицы, \hat{P} – оператор потенциальной энергии.

В уравнении (2) заложена двойственная корпускулярно-волновая природа микрочастиц. Функция $U(\vec{r})$ имеет смысл энергии локализованных точечных частиц в классическом смысле. Уравнение (9.2) лорентц-неинвариантно и справедливо лишь для малых скоростей микрочастиц. Уравнение (9.2) первого порядка по времени. Это означает, что, задав волновую функцию в какой-либо начальный момент времени $t=0$, мы можем определить её положение во всех точках пространства и в любой момент времени. Волновая функция связана с реальными объектами вероятностными соотношениями. Поэтому квантовая механика является статистической теорией.

Волновая функция, подчиняющаяся уравнению (9.2), удовлетворяет принципу суперпозиции. Если ψ_1 и ψ_2 – два решения волнового уравнения, то и функция

$$\psi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 \quad (9.3)$$

является решением уравнения Шредингера и описывает какое-либо состояние квантовой системы. Состояние частицы определяется не a_1 и a_2 (постоянные величины, определяемые из граничных условий) по отдельности, а лишь величиной a_1/a_2 .

Особое значение в квантовой механике имеют стационарные состояния микрочастицы. Это такие состояния, в которых все физические параметры не

меняются с течением времени. При этом не должны меняться лишь физические наблюдаемые величины. Сама волновая функция не является наблюдаемой величиной. Положив $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-i\omega t}$, получим, что наблюдаемой является плотность вероятности обнаружения микрочастицы, то есть

$$\rho = \psi\psi^*, \quad (9.4)$$

где «*» звездочка означает комплексное сопряжение.

Тогда стационарное уравнение Шредингера принимает вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U \right] \psi = W\psi. \quad (9.5)$$

Уравнение (9.5) полностью решает проблему квантовой механики микрочастиц. Функция ψ удовлетворяет условиям на бесконечности так же и в особых точках функции $U(\vec{r})$. Функция ψ удовлетворяет (9.5) не при всех W , а лишь при некоторых определенных.

Нестационарное уравнение Шредингера в сочетании с принципом суперпозиции приводит к правилу частот Бора. Заметим, что волновая функция, описывающая физический процесс, должна быть нестационарной. Рассмотрим простейшее нестационарное состояние

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_1(\vec{r}, t) + \psi_2(\vec{r}, t), \quad (9.6)$$

где

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \psi_1(\vec{r})e^{i(\omega_1 t + \delta_1)}, \quad \psi_2(\vec{r}, t) = \psi_2(\vec{r})e^{i(\omega_2 t + \delta_2)},$$

причем δ_1, δ_2 – начальные фазы.

Вычислим в состоянии (9.6) плотность вероятности $\rho = \psi\psi^*$, тогда получим

$$\rho = (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) + 2(\psi_1\psi_2)\cos[(\omega_2 - \omega_1)t + (\delta_2 - \delta_1)]. \quad (9.7)$$

Такая ненормированная плотность вероятности состояния ψ содержит постоянный член $(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$ и интерференционный член $2(\psi_1\psi_2)\cos[(\omega_2 - \omega_1)t + (\delta_2 - \delta_1)]$, периодически изменяющийся во времени с боровской частотой $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1 = (W_2 - W_1)/\hbar$.

Таким образом, плотность вероятности (9.7) может изменяться от $(|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2)$ до $(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$. Она содержит член, осциллирующий с боровской частотой ω_{21} . Поэтому приведенное рассуждение в сочетании

с классической электродинамикой приводит к утверждению о том, что с той же частотой должно происходить излучение света. Действительно, если e – заряд частицы, то $e\rho(t)$ – плотность вероятности обнаружения заряда частицы в пространстве. В классической физике $e\rho(t)$ – плотность заряда, колеблющаяся во времени, должна излучать свет. Аналогичная ситуация имеет место и в квантовой механике, где плотность заряда заменяется плотностью вероятности обнаружить заряд.

Как и в теории Бора, боровская частота появляется в результате обнаружения перехода атома с одного энергетического уровня на другой.

МГТУ им. И. П. Шамякина

10. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме

Предположим, что волна-частица может совершать одномерное движение вдоль оси Ox в области пространства $0 \leq x \leq l$. При этом вероятность проникновения частицы за пределы данной области равна нулю.

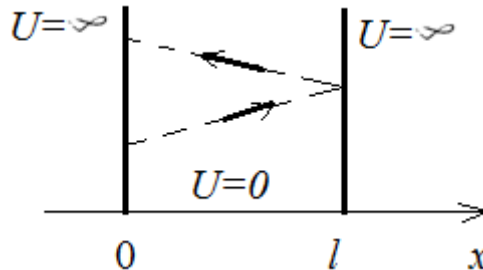


Рисунок 9 – Движение микрочастицы в бесконечно глубокой потенциальной яме

Рассмотренная задача решается исходя из стационарного уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(W - U)\psi = 0. \quad (10.1)$$

За пределы потенциальной ямы частица попасть не может ($U=\infty$), а в пределах потенциальной ямы потенциальная энергия $U=0$. Тогда для решения уравнения (10.1) используют граничные условия: $\psi(0)=\psi(l)=0$.

В области ямы уравнение Шредингера имеет вид:

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad (10.2)$$

где

$$k^2 = 2mW/\hbar^2. \quad (10.3)$$

Решение уравнения (10.2) имеет вид:

$$\psi = A \sin(kx + \alpha), \quad (10.4)$$

где A и α – неопределенные постоянные. Из условия $\psi(0)=0$ следует, что $\sin(\alpha)=0$, тогда $\alpha=0$. Из условия $\psi(l)=A \sin(kl)=0$ получаем, что $kl = \pm \pi n$ ($n=1, 2, 3, \dots$).

Подставив $k = \pm \pi n/l$ в (3), получим значения энергии $W_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ml^2}$.

Подставив величину k в (10.4), получим:

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right). \quad (10.5)$$

Для нахождения коэффициента A воспользуемся условием нормировки волновой функции

$$\int_0^l \psi_n^2 dx = A^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi nx}{l}\right) dx = 1,$$

тогда $A = \sqrt{2/l}$. Волновая функция в заданных стационарных состояниях является нормированной, и поэтому

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi nx}{l}\right). \quad (10.6)$$

Плотность вероятности обнаружения микрочастицы на данном энергетическом уровне равна:

$$\rho_n = \psi_n \psi_n^* = \left(\frac{2}{l}\right) \sin^2\left(\frac{\pi nx}{l}\right). \quad (10.7)$$

Графики функций ψ_n и ρ_n приведены на рисунке 10.

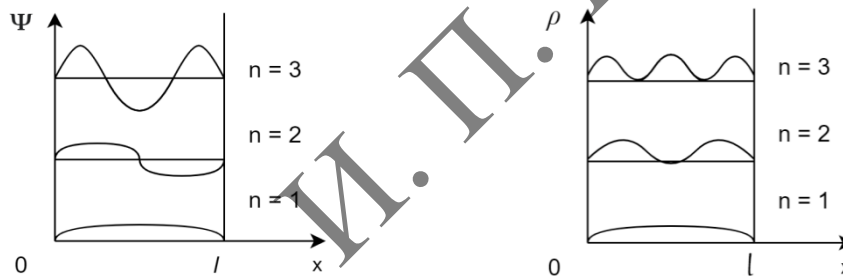


Рисунок 10 – Зависимости волновой функции ψ_n и плотности вероятности $\rho_n(x)$ ($n=1,2,3$)

Таким образом, лишь в нечётных состояниях $n=1,3,\dots$ частица может быть локализованной в центре ямы для атомной системы. В чётном состоянии $n=2, 4,\dots$ частица, в основном, находится на краю ямы.

11. Уровень Ферми электронов в металле

Поведение электронов в металле можно рассматривать как движение свободных электронов в трехмерной потенциальной яме конечной глубины. При этом энергетический спектр электронов значительно усложняется. Вследствие независимого движения электронов вдоль осей X, Y, Z уровни энергии электронов достаточно просто вычисляются с учетом полученных ранее результатов для одномерной потенциальной ямы бесконечной глубины.

Пользуясь полученными результатами для бесконечно глубокой потенциальной ямы, можно записать выражения для уровней энергии частицы в трёхмерном потенциальном ящике $0 < x < a$, $0 < y < b$, $0 < z < c$, то есть

$$W_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \quad (11.1)$$

где $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$. Соответствующие им волновые функции даются соотношениями:

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi n_1 x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi n_2 y}{b}\right) \sin\left(\frac{\pi n_3 z}{c}\right). \quad (11.2)$$

Энергия в основном состоянии $E_{1,1,1} \sim \frac{\hbar^2}{ml^2}$, где l – линейный размер области движения микрочастицы.

В первом приближении силы притяжения электрона к ядру можно усреднить и представить в виде постоянного потенциала притяжения $-U_0$, то есть

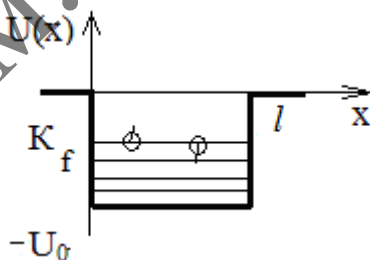


Рисунок 11 – Схема заполнения энергетических уровней в потенциальном ящике (яме)

Таким образом, если учесть принцип Паули, когда на каждом энергетическом уровне может быть не более двух электронов с противоположными собственными механическими моментами, и если в объёме металла размером l^3 имеется n электронов, то крайнему уровню K_f соответствует энергия уровня с номером $N/2$. То есть полная энергия электрона на этом уровне находится из соотношения:

$$W_{n_1, n_2, n_3} = \frac{p_f^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (11.3)$$

Импульс электрона определяется из соотношения:

$$p_f = \frac{\pi\hbar}{2l} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{1/2}. \quad (11.4)$$

Заполненные электронами состояния находятся внутри области радиусом $n_f = R = 2lp_f / \pi\hbar$. Здесь $n_f^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$.

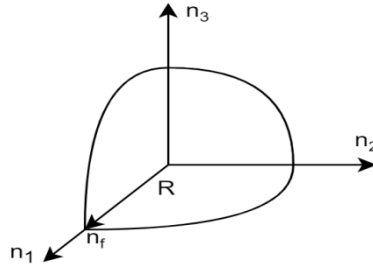


Рисунок 12 – На схеме представлена 1/8 часть сферы радиусом R

Полное число заполненных состояний в ящике будет равно количеству кубических ячеек, ограниченных сферической полостью на рисунке 12. Объем, ограниченный сферической поверхностью, равен 1/8 объема сферы, поэтому можно определить полное число состояний в ящике соотношением:

$$n = \frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) = \frac{4l^3 p_f^3}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Поскольку в каждом состоянии находится два электрона, то полное число электронов равно $\frac{8Vp_f^3}{3\hbar^3\pi^2}$ ($V=l^3$), поэтому $p_f = \left(\frac{3\hbar^3\pi^2 n}{8V} \right)^{1/3}$. Тогда энергия

Ферми находится из соотношения:

$$K_f = \frac{p_f^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{3\hbar^3\pi^2 n}{8V} \right)^{2/3}. \quad (11.5)$$

Таким образом, энергия Ферми для электронов в металлах $\sim (n/V)^{2/3}$, то есть она пропорциональна концентрации свободных электронов в степени «2/3».

12. Линейный гармонический осциллятор

Рассмотрим движения квантовой частицы под действием квазиупругой силы $F_x = -k_x x$, где k_x – коэффициент квазиупругой силы. Потенциальная энергия гармонического осциллятора дается соотношением:

$$U(x) = \frac{k_x x^2}{2} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2. \quad (12.1)$$

В классической физике такая частица совершает колебания с частотой $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_x}{m}}$, а её энергия может принимать любые значения, в том числе равные нулю. Потенциальную энергию в соответствии с выражением (12.1) можно изобразить графически

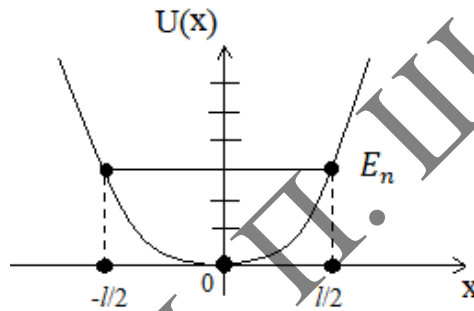


Рисунок 13 – Зависимость потенциальной энергии от координаты x , W_n – энергия частицы при $x=l/2$

Рассмотрим решение задачи квантовой механики на основе уравнения Шредингера

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W - \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \right) \psi = 0. \quad (12.2)$$

Решение уравнения Шредингера с потенциальной энергией (12.1) выражается через полиномы Эрмита ($H_n(y)$), то есть

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m \omega_0}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-(m \omega_0 / 2 \hbar) x^2} H_n \left(x \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} \right). \quad (12.3)$$

Здесь введено обозначение:

$$H_n(\xi) = (-1)^n \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n},$$

где $n=0,1,2,\dots$

Волновая функция ψ_n является нормированной, то есть для нее выполняется соотношение:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x) dx = 1.$$

Графики функций ψ_1, ψ_2 имеют вид:

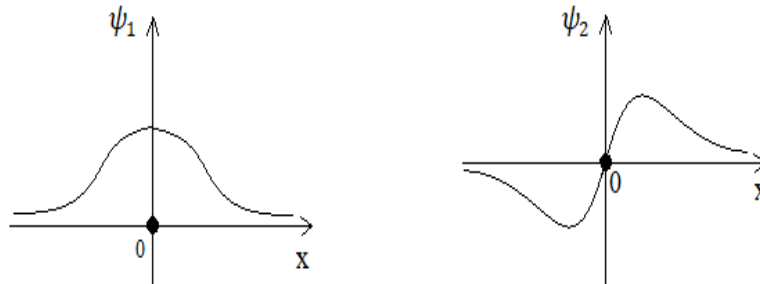


Рисунок 14 – Зависимости волновых функций ψ_1, ψ_2 от координаты x

Соответствующие плотности вероятностей ($\rho_n = |\psi_n|^2$) выражаются зависимостями:



Рисунок 15 – Зависимости плотностей вероятности ρ_1, ρ_2 от координаты x

В основном состоянии осциллятор сосредоточен вблизи положения равновесия ($x = 0$). Во втором возбужденном состоянии – на периферийных участках потенциальной ямы. Возможен лишь набор энергий $W_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, где n – целое число. Классический осциллятор излучает свет лишь одной частоты ω_0 . Казалось бы, что в соответствии с правилами частот Бора возможно излучение со всевозможными кратными частотами $n\omega_0$ (n – целое число). На самом деле, при излучении фотонов этого не происходит. В полуклассической квантовой теории Бора в связи с этим был сформулирован принцип соответствия.

Чтобы исключить кратные частоты, на переходы между уровнями энергии осциллятора было наложено ограничение, называемое правилами отбора. Согласно этому правилу, квантовое число n осциллятора при излучении и поглощении фотона может изменяться лишь на ± 1 , то есть $\Delta n = \pm 1$. Впоследствии квантовая механика позволила вычислить вероятность переходов с одного энергетического уровня на другой. Оказалось, что эта вероятность обращается в нуль, когда правило отбора не выполняется.

13. Потенциальный барьер

Рассмотрим одномерный потенциальный барьер в виде ступеньки, когда одна из его стенок удалена в бесконечность (рисунок 16).

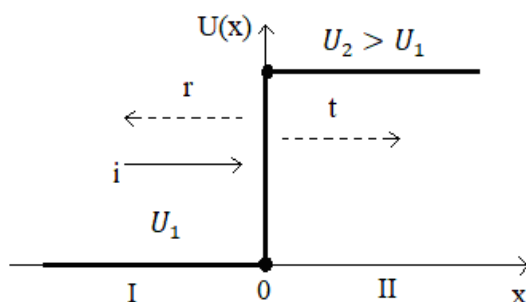


Рисунок 16 – Схема отражения и пропускания волны-частицы потенциальным барьером

Потенциальная энергия микрочастицы представляется ступенчатой кривой вида:

$$U(x) = \begin{cases} U_1 = \text{const}, x < 0, \\ U_2 = \text{const}, x > 0. \end{cases}$$

На границу $x=0$ (слева) с постоянной скоростью на потенциальную «стенку» U_2-U_1 «налетает» частица или поток частиц. С классической точки зрения частица ведет себя по-разному в зависимости от того, больше ее полная энергия величины энергии U_2 ($W > U_2$) или меньше ($W < U_2$). В первом случае, достигнув барьера, частица будет продолжать свое движение, но с меньшей кинетической энергией. Во втором случае частица не может проникнуть за этот барьер.

В случае квантово-механической частицы ее движение связано (хотя и символически) с распространением волны. Уравнение Шредингера описывает движение частицы, то есть распространение волны-частицы. Переход от поведения волн к поведению микрочастиц устанавливается вероятностными законами. Уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (13.1)$$

где $k = \frac{\sqrt{2m(W-U)}}{\hbar}$. Величина k имеет смысл волнового числа волны-частицы. Вместо потока частиц необходимо предположить, что в области I к границе $x=0$ распространяется плоская монохроматическая волна с единичной амплитудой

$$\psi_1 = e^{i(\omega t - k_1 x)}. \quad (13.2)$$

Чтобы удовлетворить граничным условиям для волновой функции и ее первой производной, в области I должна существовать отраженная волна

$$\psi_1' = re^{i(\omega t + k_1 x)}, \quad (13.3)$$

а в области II – прошедшая волна

$$\psi_2 = te^{i(\omega t - k_2 x)}. \quad (13.4)$$

Здесь r, t – амплитудные коэффициенты отражения и пропускания волн.

На границе барьера $x=0$ выполняются соотношения:

$$\begin{aligned} \psi_1(x=0) + \psi_1'(x=0) &= \psi_2(x=0), \\ \frac{d\psi_1}{dx}(x=0) + \frac{d\psi_1'}{dx}(x=0) &= \frac{d\psi_2}{dx}(x=0). \end{aligned} \quad (13.5)$$

Подставив выражения (13.2) – (13.4) в (13.5), получим следующую систему уравнений:

$$1 + r = t, \quad k_1 - k_1 r = k_2 t. \quad (13.6)$$

Из системы уравнений (13.6) следует, что коэффициенты отражения и пропускания имеют вид:

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (13.7)$$

Выражения (13.7) являются аналогами формул Френеля при нормальном падении оптической волны на границу раздела двух сред с различными показателями преломления. Формулы (13.7) справедливы не только при $U_2 > U_1$ (потенциальный барьер), но и при $U_2 < U_1$ (потенциальная яма).

Принципиальное отличие квантово-механического решения вопроса об отражении и пропускании волн состоит в том, что в классической физике частица локализована, а в квантовой механике – нет. В классической физике говорят об энергии и состоянии частицы, когда она находится в определенном месте пространства, независимо от того, что происходит в соседних областях пространства. Квантово-механическая волна относится ко всему пространству. Падающая волна органически связана с отраженной и прошедшей волнами. Полная энергия W относится не к какой-либо одной волне, а к состоянию частицы в целом, определяемому всеми тремя функциями ψ_1, ψ_1', ψ_2 .

При $W > U_2$ в классическом случае нет отраженной волны, в квантовом есть вероятность обнаружить частицу, движущуюся в противоположном направлении по отношению к падающей. Для однородной волны вводят понятие плотности вероятности потока вещества. Можно говорить о скорости

распространения вероятности такого потока $v = \frac{P}{m} = \frac{\hbar k}{m}$. Тогда плотность

вероятности потока массы равна $m v \psi \psi^* = \hbar k \psi \psi^*$. В падающей, отраженной, прошедшей волне они находятся из соотношений:

$$P_i = \hbar k_1 \psi_1 \psi_1^* = \hbar k_1, \quad P_r = \hbar k_1 / r^2 \psi_1 \psi_1^* = \hbar k_1 / r^2, \quad P_t = \hbar k_2 / t^2 \psi_1 \psi_1^* = \hbar k_2 / t^2.$$

Тогда коэффициенты отражения R и пропускания T равны:

$$R = \frac{P_r}{P_i} = r^2 = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2, \quad T = \frac{P_t}{P_i} = \frac{k_2}{k_1} / t^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (13.8)$$

Очевидно, что $R + T = 1$ в соответствии с законом сохранения массы вещества.

Рассмотрим случай отражения волны, когда $W < U_2$. Этот случай аналогичен случаю полного внутреннего отражения света в оптике. В этом случае, как следует из формулы (13.1), величина k_2 — чисто мнимая величина, то есть $k_2 = i\alpha$ ($\alpha < 0$). Тогда получаем следующее выражение для прошедшей волны:

$$\psi_2 = |t| e^{i\omega t} e^{-\alpha/x}. \quad (13.9)$$

Амплитуда волны в области II экспоненциально затухает. Очевидно, что коэффициент отражения волны $R = 1$. Таким образом, волна проникает во вторую среду на некоторую эффективную глубину $l = 1/2|\alpha|$. При этом полагается, что амплитуда прошедшей волны уменьшается в e раз во второй среде. Здесь $l = 1/2|k_2|$, то есть

$$l = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_2 - W)}}. \quad (13.10)$$

Данное явление называется туннельным эффектом.

Несмотря на то, что волна-частица полностью отражается от барьера, то есть вероятность отражения равна 1, волна проникает во вторую среду. Разрешение кажущегося парадокса состоит в том, что наше решение относится к стационарным состояниям микрочастиц (не зависящим от времени). Проникновение же волны во вторую область происходит в переходный период, когда состояние во времени еще не установилось. В этот переходный период полного отражения еще нет ($R \neq 1$). Исследование же переходного процесса во время взаимодействия волны-частицы с барьером может быть основано лишь на нестационарном уравнении Шредингера.

14. Приближённая теория квантования движения микрочастицы в центрально-симметричном поле атома водорода

Рассмотрим потенциальную яму, в которой потенциальная энергия меняется обратно пропорционально расстоянию до центра притяжения. В случае атома водорода потенциальная энергия взаимодействия электрона и протона имеет вид:

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}.$$

В случае водородоподобного иона следует e^2 заменять на Ze^2 , где Z – число протонов в ядре атома. Потенциальная энергия электрона имеет вид:

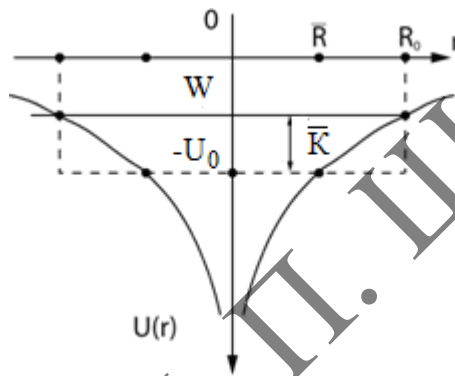


Рисунок 17 – Зависимость потенциальной энергии микрочастицы от расстояния r до центра кулоновского притяжения

В приближённых расчётах энергетических уровней мы используем потенциальную яму, изображённую пунктирной линией. При этом электрон может удаляться от центра кулоновского притяжения на некоторое максимальное расстояние R_0 . В качестве оценки среднего удаления возьмём $\bar{R} = \frac{R_0}{2}$. Глубина U_0 эквивалентной прямоугольной ямы определяется как значение U_0 при $r = \bar{R}$, то есть $U_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{\bar{R}}$. В случае стоячей волны n -го порядка в пределах этой ямы укладывается n полуволн, то есть выполняется соотношение:

$$n \frac{\lambda_n}{2} = 2R_0, \quad \lambda_n = \frac{4R_0}{n}. \quad (14.1)$$

Положим, что средний импульс электрона равен импульсу волны де Бройля, то есть

$$\bar{P}_n = k_n \hbar = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_n} = \frac{\pi\hbar n}{2R_0}. \quad (14.2)$$

Тогда средняя кинетическая энергия

$$\bar{K} = \frac{\bar{P}_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8mR_0^2}. \quad (14.3)$$

из рисунок 17 следует, что

$$\bar{K} = -W = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R_0}. \quad (14.4)$$

Приравняв (14.3) и (14.4), получим:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{8mR_0^2}, \text{ тогда } R_0 = \frac{\pi^3 \hbar^2 \epsilon_0}{2mZe^2} n^2. \quad (14.5)$$

Истинное значение R_n дается соотношением:

$$R_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Zme^2} n^2, \quad \frac{R_0}{R_n} = \frac{\pi^3}{2} \frac{1}{4\pi} = \frac{\pi^2}{8} \approx 1.$$

Вследствие приближённости модели, результат является удовлетворительным.

Подставляя приближённое значение R_0 в (14.4), получим приближённое значение энергии на энергетических уровнях

$$W_n = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2 \cdot 2mZe^2}{\pi^3 \hbar^2 \epsilon_0 n^2} = \frac{-Z^2 e^4 m}{2\pi^4 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}. \quad (14.6)$$

Точное значение W_n следующее:

$$W_n = \frac{-Z^2 e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}. \quad (14.7)$$

Эти значения энергии на 38 % меньше приближенной величины. Однако полученное решение даёт правильную зависимость от величины заряда электрона e , его массы m , порядкового номера уровня n , значения постоянной Планка \hbar и диэлектрической проницаемости вакуума ϵ_0 .

15. Движение микрочастицы в центрально-симметричном поле кулоновского притяжения

Предположим, что волна-частица (волновой пакет) с волновым числом k движется по окружности радиусом R , как показано на рисунке 18.

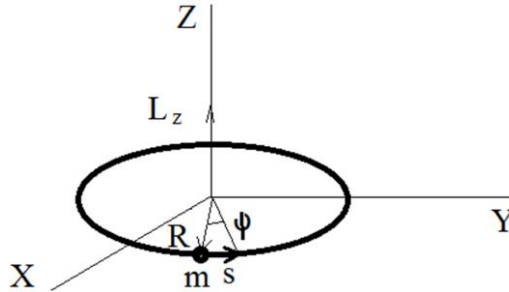


Рисунок 18 – Волновой пакет, движущийся по окружности радиуса R .
Длина дуги $s = R\phi$

Такой пакет имеет момент импульса относительно оси Z , равный $L_z = Rp = R(\hbar k)$. На дуге s (рисунок 18) волновую функцию пакета можно записать в виде

$$\psi \cong e^{i(ks - \omega t)} = e^{i(kR\phi - \omega t)}, \quad (15.1)$$

где $s = R\phi$.

Поскольку $\psi(\phi=0)$ и $\psi(\phi=2\pi)$ измеряются в одной и той же точке пространства, то их значения совпадают, то есть

$$e^{ikR(0)} = e^{ikR(2\pi)} \quad (15.2)$$

или $1 = e^{i2\pi kR}$.

Последнее выражение может выполняться только когда kR – целое число. Это число обычно обозначают через m_l . Тогда получают: $kR = m_l$. Умножим обе части этого равенства на \hbar , тогда получим $L_z = m_l \hbar$, где $L_z = \hbar kR = pR$, $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Соответствующая волновая функция имеет вид: $\psi \cong e^{i(kR\phi - \omega t)} = e^{i(m_l\phi - \omega t)}$.

Мы показали, что если волновая функция частицы содержит множитель $e^{im_l\phi}$, то у такой частицы будет составляющая момента импульса на ось Z , равная $L_z = m_l \hbar$. Мы видим, что проекция момента импульса квантуется, то есть составляет целое кратное \hbar .

Иными словами, в рамках квантовой механики движение электрона в атоме описывается стационарным уравнением Шредингера, причем L_z может принимать следующие значения: $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar, \dots$

Решения уравнения Шредингера в сферической системе координат, зависящие от полярного угла θ и азимутального угла φ , в сферической системе координат r, θ, φ можно записать в виде

$$\Psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\varphi) = \Theta_l(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)R(r) = Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)R(r), \dots\dots\dots(15.3)$$

где $Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$ – сферические функции, $\Phi_{m_l} = e^{im_l\varphi}$. Из приведенного ранее рассмотрения следует, что волновой функции Ψ_{n,l,m_l} должна соответствовать составляющая момента импульса по оси Z, равная $L_z = m_l\hbar$.

В случае $n=2$ для ненормированных волновых функций можно применить известное решение уравнения Шредингера вида

$$\Psi_{2,0,0} = \left(1 - \frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a}. \quad (15.4)$$

Однако наряду с ними существуют и другие решения:

$$\Psi_{2,1,1} = re^{-r/2a} \sin(\theta)e^{i\varphi}, \Psi_{2,1,0} = re^{-r/2a} \cos(\theta), \Psi_{2,1,-1} = re^{-r/2a} \sin(\theta)e^{-i\varphi}. \quad (15.5)$$

Эти решения можно проверить подстановкой их в уравнение Шредингера в сферической системе координат.

Таким образом, при $n=2$ квантовое число l может принимать два значения: 0 или 1. При $l=1$ квантовое число m_l пробегает три значения: 1, 0, -1.

В соответствии с общим выражением для значения энергии на n -м энергетическом уровне всем четырем волновым функциям (15.4), (15.5) отвечает один и тот же энергетический уровень $W_2 = -(1/4)(13,6)\text{эВ}$. В общем случае (при различных n) каждой волновой функции или собственной функции соответствует свой единственный энергетический уровень, или собственное значение. Однако кулоновский потенциал (кулоновская потенциальная энергия) обладает особым свойством: всем (нескольким) собственным функциям с одними и теми же квантовыми числами n соответствует единственное значение энергии. Из более общих соображений можно показать, что значение квантового число l никогда не превосходит $(n-1)$, то есть $l_{\max} \leq (n-1)$. При этом квантовое число m_l пробегает ряд целочисленных значений от $-l$ до $+l$.

Заметим, что значения проекции момента импульса на ось Z меняются от $-\hbar l$ до $+\hbar l$. Если экспериментально измерять величину момента импульса относительно произвольной оси, то максимальное значение будет равно $l\hbar$. Тогда проекции момента импульса на ось Z характеризует ориентацию волновой функции, то есть орбитали (с соответствующими углами θ и φ). Отношение m_l к l представляет собой угол между осью Z и направлением момента импульса частицы.

16. Гиромангнитное отношение

Глубокое понимание природы магнетизма пришло лишь с созданием квантовой теории, объяснившей природу атомов и молекул и твердых тел. Классическая теория магнетизма Ланжевена имела успех лишь по той причине, что умалчивалась истинная природа наличия в веществе «готовых» магнитных моментов или стационарных орбит атомов, по которым вращаются электроны. Наиболее полное объяснение дала лишь квантовая теория магнетизма.

Электрон, вращающийся в пределах оболочки атома, обладает не только орбитальным моментом импульса \vec{L} , но и магнитным моментом \vec{m} (рисунок 19).

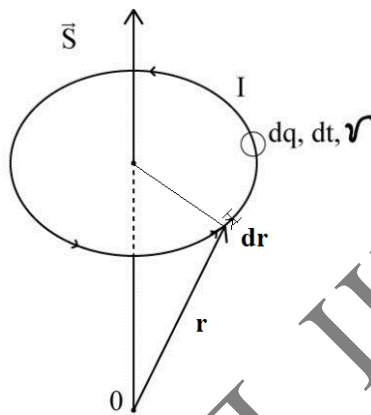


Рисунок 19 – Схема циркуляции тока в атоме

Согласно электродинамике, замкнутый виток постоянного тока I (рисунок 19) обладает магнитным моментом

$$\vec{m} = I\vec{S}, \quad (16.1)$$

где \vec{S} – вектор площади, натянутой на контур с током. Данный вектор выражается следующим соотношением:

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \oint [\vec{r} d\vec{r}] \quad (16.2)$$

и не зависит от выбора начала системы координат XYZ, то есть контур тока замкнут. Направление обхода контура совпадает с направлением тока, и магнитный момент, создаваемый током, дается соотношением:

$$\vec{m} = \frac{1}{2} \oint I[\vec{r} d\vec{r}]. \quad (16.3)$$

Учитывая, что $I = \frac{dq}{dt}$ и $d\vec{r} = \vec{v} dt$, получим следующее соотношение:

$$\vec{m} = \frac{1}{2\mu} \oint [\vec{r} \vec{p}] dq, \quad (16.4)$$

где $\vec{p} = \mu\vec{v}$ – импульс микрочастицы (μ – масса микрочастицы).

Формула (16.4) показывает, что для приобретения магнитного момента телом необходимо иметь систему зарядов dq , знать импульс частицы \vec{p} и её положение в пространстве \vec{r} . При этом конкретизация контура не существенна. Тогда магнитный момент тела можно представить в самом общем виде как суперпозицию магнитных моментов движущихся зарядов, то есть

$$\vec{m} = \frac{1}{2\mu} q[\vec{r}\vec{p}]. \quad (16.5)$$

При этом предполагается, что в атоме совершается движение точечных зарядов. В этом случае применима классическая физика, позволяющая записать следующее выражение:

$$\vec{m} = \Gamma \vec{L}, \quad (16.6)$$

где $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$ – механический момент импульса частицы, $\Gamma = q/2\mu$ – гиромагнитное отношение. Для электрона, вращающегося по орбите атома, $q = -e$, $\mu = m_e$, поэтому гиромагнитное отношение находим из соотношения:

$$\Gamma = -\frac{e}{2m_e}. \quad (16.7)$$

17. Магнитный момент атома

Переход от классических представлений к квантовым осуществляется заменой величин \vec{m} и \vec{L} операторами, то есть приходим к следующим соотношениям:

$$\hat{\vec{m}} = \Gamma \hat{\vec{L}}, \quad (17.1)$$

где $\hat{\vec{L}} = [\hat{r}\hat{p}]$ – оператор механического момента атома. Поскольку $\hat{\vec{m}}$ и $\hat{\vec{L}}$ отличаются лишь множителем Γ , их физические свойства аналогичны друг другу. Так как $\hat{\vec{L}}$ не зависит от выбора системы координат, то и $\hat{\vec{m}}$ также не зависит от выбора системы координат. Составляющие магнитного момента на ортогональные оси не могут быть одновременно измерены. В стационарном состоянии определённые значения могут принимать квадраты магнитного момента и его проекция на выбранное направление m_z . Для орбитального движения электрона имеет место соотношение:

$$m_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -m_B m_l, \quad (17.2)$$

где $m_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ – магнетон Бора.

Магнетон Бора можно рассматривать как квант магнитного момента. «Полный» магнитный момент выражается соотношением

$$|\vec{m}| = m_B \sqrt{l(l+1)}, \quad (17.3)$$

где l – орбитальное квантовое число. Далее имеет место соотношение:

$$\frac{m_z}{L_z} = -\frac{e}{2m_e} = \Gamma_e, \quad (17.4)$$

где Γ_e – гиромагнитное отношение электрона в атоме.

18. Опыт Штерна и Герлаха

Экспериментальное подтверждение квантования магнитного момента атома было дано в опытах Штерна и Герлаха. Схема опыта имеет вид:

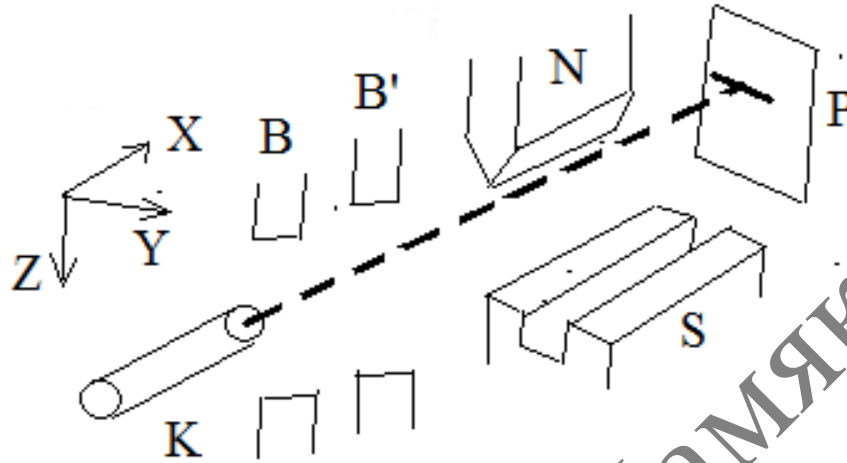


Рисунок 20 – Схема опыта Штерна и Герлаха

В сосуде с высоким вакуумом создавался с помощью диафрагм B, B' резко ограниченный атомный пучок исследуемого элемента, возникающий в результате испарения металла в печи K . Пучок проходил через сильное магнитное поле, создаваемое между полюсными наконечниками N и S электромагнита. Форма наконечника в виде призмы (N) и паза (S) позволяла создать в пространстве неоднородное магнитное поле. После прохождения магнита пучок попадал на фотопластинку P . Поведение атомного пучка описывается силой \vec{f} , действующий на него, то есть

$$\vec{f} = (\vec{m}\nabla)\vec{H}, \quad (18.1)$$

где \vec{m} – магнитный момент атома,

∇ – оператор Пуассона.

Проекция силы f_z на направление магнитного поля равна:

$$f_z = m_x \frac{\partial H_z}{\partial x} + m_y \frac{\partial H_z}{\partial y} + m_z \frac{\partial H_z}{\partial z}. \quad (18.2)$$

Первые два слагаемых не играют роли, так как атом в магнитном поле совершает прецессию вокруг оси Z с ларморовской частотой $\Omega = eH / 2m_e$ (H – напряженность магнитного поля). Поэтому проекция магнитного момента на оси X и Y совершает колебания с высокой частотой $\Omega/2\pi$, становясь

то положительной величиной, то отрицательной и в среднем равной нулю. Схема представлена на рисунке 21.

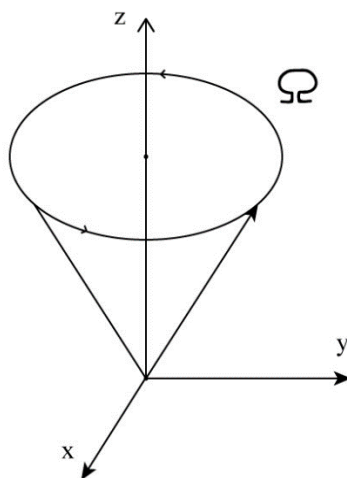


Рисунок 21 – Схема ларморовской прецессии атома

В условиях опыта следует полагать $\bar{m}_x = \bar{m}_y = 0, \bar{m}_z \neq 0$, поэтому

$$f_z \approx m_z \frac{\partial H_z}{\partial z}. \quad (18.3)$$

В опыте вначале получали след атомного пучка при выключенном магнитном поле, а затем при включённом. Если бы проекция магнитного момента m_z могла принимать всевозможные значения, непрерывно меняясь, как требует классическая физика, то сила f_z также принимала бы всевозможные значения, непрерывно меняясь. Включение магнитного поля привело бы только лишь к уширению пучка. Однако, по квантовой теории, проекция m_z , а с ней и сила f_z , квантованы, то есть могут принимать лишь дискретный ряд значений. Если орбитальное число атома l , то при расщеплении получится $2l+1$ пучков (то есть число пучков равно числу возможных значений, которые может принимать квантовое число m_z). Таким образом, в зависимости от величины l пучок должен расщепиться на нечётное число пучков: 1, 3, 5,

В первоначальных опытах использовались атомы серебра. В магнитном поле пучок расщеплялся на две составляющие. Тот же результат получался для атомов водорода. Для других атомов наблюдалось либо чётное, либо нечётное число расщеплений. Однако дискретное число пучков наблюдалось всегда. Это указывало на квантование магнитного и механического момента атома.

19. Опыт Эйнштейна и де Гааза

Рассмотрим гиромангнитное явление, возникающее при намагничивании парамагнетика или ферромагнетика в постоянном или переменном магнитном поле. Если атом обладает магнитным моментом \vec{m}_a , то он обладает механическим моментом $\vec{l}_a = \vec{m}_a / \Gamma$, где Γ – гиромангнитное отношение.

Магнитный момент тела равен: $\sum_a \vec{m}_a = V\vec{M}$, где \vec{M} – вектор намагниченности (магнитный момент единицы объема вещества), V – объем тела. Здесь справедливо известное соотношение: $\vec{B} = \mu_0\vec{H} + \vec{M}$.

Поэтому в результате намагничивания момент количества движения электронных оболочек $\vec{L}_{об} = \sum_a \vec{l}_a = V\vec{M} / \Gamma$. Однако повороты атомов и их магнитных моментов осуществляются под действием столкновений, то есть внутренних сил, которые не могут изменить общий момент количества движения тела. Отсюда следует, что кристаллическая решетка должна получить равный по величине и противоположный по знаку момент $\vec{L}_{реш} = -V\vec{M} / \Gamma$.

Если до намагничивания тело находилось в состоянии покоя, то после намагничивания оно должно прийти во вращение с угловой частотой ω , то есть

$$I\vec{\omega} = -\frac{V}{\Gamma}\vec{M}, \quad (19.1)$$

где I – момент инерции тела. Схема опыта имеет вид:

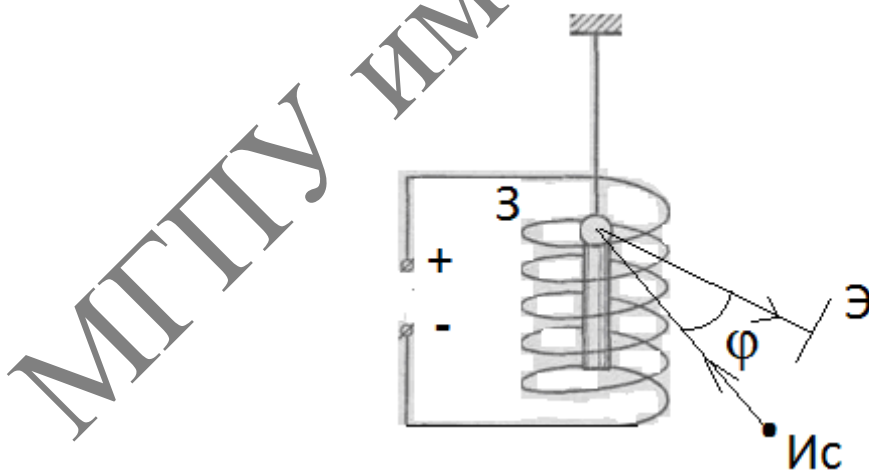


Рисунок 22 – Схема опыта по обнаружению гиромангнитного эффекта

В опыте на рисунке 22 угол поворота φ за время t фиксируется по углу отклонения отраженного от зеркала 3 светового луча. Тогда угловая скорость $\omega = \varphi/t$. Здесь тело массой m цилиндрической формы имеет момент инерции

$I = mr^2/2$ (r – радиус цилиндра). Магнитный момент атома равен магнетону Бора $m_B = e\hbar/2m_e$, тогда магнитный момент тела равен

$$VM = \frac{m}{A} N_A m_B, \quad (19.2)$$

где N_A – число Авогадро, A – атомная масса.

Предположим, что магнитный момент атома обусловлен орбитальным движением электрона в атоме, тогда гиромагнитное отношение $\Gamma = -e/2m_e$. Подставив выражение (19.2) в (19.1), получим выражение для измеренной частоты вращения:

$$\omega = \frac{2N_A m_B}{A\Gamma r^2}. \quad (19.3)$$

Гиромагнитное отношение равно

$$\Gamma = \frac{2tN_A m_B}{A\phi r^2}. \quad (19.4)$$

Если цилиндр изготовлен из серебра или щелочного металла, у которого орбитальное квантовое число равно нулю ($l=0, m=0$), то измеренная величина ω оказывается в два раза меньше, чем рассчитанная по формуле (19.4). Данный эффект связан со спином электрона, когда проекция спина на ось вращения цилиндра $s_z = \pm\hbar/2$. Спиновое квантовое число $s=1/2$. Данный опыт позволяет определить спин электрона.

Опыты Эйнштейна и де Газа по определению гиромагнитного отношения показали, что для атомов железа, серебра, щелочных металлов, водорода и др. гиромагнитное отношение равно

$$\frac{m_z}{L_z} = \left| \frac{e}{m_e} \right|, \quad (19.5)$$

то есть вдвое больше, чем требовалось по существующей теории.

20. Спин электрона

Наряду с опытами Штерна и Герлаха прямые опыты Эйнштейна и де Гааза по определению гиромагнитного отношения показали, что для атомов железа гиромагнитное отношение равно

$$\frac{m_z}{L_z} = \left| \frac{e}{m_e} \right|, \quad (20.1)$$

то есть вдвое больше, чем требовалось по существующей теории.

Для описания этой структуры квантовых уровней была введена гипотеза о спине электрона. Электрон имеет также и собственный механический момент количества движения (момент импульса), напоминая вращающийся волчок. Этот механический и ему соответствующий магнитный моменты обозначаются как \vec{L}_S и \vec{m}_S . Спиновый механический момент чаще всего обозначается как \vec{S} . Паули систематически ввёл спин электрона в квантовую механику, обобщив уравнение Шредингера до двух уравнений (уравнения Паули), содержащих спин. Затем концепция спина, как внутреннего свойства элементарной частицы, была распространена на другие элементарные частицы и системы частиц. Определённые значения может принимать и квадрат полного спина \hat{S}^2 , и одна из его проекций (например \hat{S}_z). Максимальное значение S_z равно $\hbar S$. Тогда число всех возможных проекций, соответствующих данному квантовому числу S , равно $2S+1$. Опыт Штерна и Герлаха показал, что для электрона оно равно 2, т. е. $2S+1=2$, откуда $S = \frac{1}{2}$.

Спин частицы может быть либо целым, либо полуцелым. Для электрона он равен $1/2$. Из ранее приведенных выражений для \vec{L}^2 следует, что $\vec{S}^2 = \hbar^2 S(S+1)$, а для электрона $\vec{S}^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) = 3\hbar^2 / 4$. Таким образом, в опытах Штерна и Герлаха имеет место соотношение вида:

$$\left| \frac{m_z}{L_z} \right| = \left| \frac{m_z}{S_z} \right| = \frac{m_B}{\hbar/2} = \frac{e}{\mu_e}. \quad (20.2)$$

Для упрощения будем иметь в виду водородоподобный атом, а также многоэлектронный атом или ион с наружным (одним) электроном. В квантовой механике его состояние описывается четырьмя квантовыми числами (главным квантовым числом n , орбитальным квантовым числом ℓ , магнитным квантовым числом m_ℓ и спиновым квантовым числом m_s).

Основной тип взаимодействия между электроном атома и ядром есть электростатическое взаимодействие их зарядов (оно определяет наличие главных квантовых чисел n). Однако, так как электрон движется относительно атомного ядра, то возникает дополнительное взаимодействие, обусловленное спином электрона и зарядом ядра. Его называют спин-орбитальным взаимодействием. Перейдём в систему координат, связанную с вращающимся электроном. В такой системе отсчёта ядро движется со скоростью электрона и создаёт магнитное поле (как положительно-заряженная частица). Такое магнитное поле \vec{H} воздействует на спиновый магнитный момент \vec{m}_s , покоящегося в этой системе координат электрона. Поскольку заряд электрона и протона одинаковы, то движущийся электрон в месте расположения ядра создаёт такое же магнитное поле. Поэтому спин-орбитальное взаимодействие можно рассматривать как взаимодействие между орбитальным и магнитными моментами электрона.

Спиновый магнитный момент \vec{m}_s может ориентироваться либо вдоль орбитального магнитного поля, либо противоположно ему. В первом случае потенциальная энергия взаимодействия электрона и ядра атома уменьшается, а во втором увеличивается. Поэтому из-за спин-орбитального взаимодействия каждый энергетический уровень атома расщепляется на два подуровня (дублет). Появляется тонкая структура энергетического уровня. Совокупность подуровней, на которые расщепляются рассматриваемый уровень, называется мультиплетом. Различают: дублет, триплет, квартет, квинтет, ...

Оценим величину этого расщепления ΔU , учитывая, что величина магнитного поля протона в месте расположения движущегося электрона $\vec{H} = e[\vec{v} \vec{r}]/r^3$, где \vec{r} – радиус-вектор электрона, v – его скорость. Тогда $H = ve/r^2$, а $\Delta U = -\vec{m}_s \vec{H} \sim m_B \cdot v \cdot e/r^2 = \hbar^2 v/m_e \cdot r^2$.

21. Полный механический момент электрона в атоме

Если атом уже имеет определённое значение орбитального числа l (то есть \vec{L}^2 и L_z), то выделенное направление (ось Z) при $\vec{L}^2 \neq 0$ определяется вектором \vec{L} . Спин \vec{S} может быть ориентирован либо по \vec{L} , либо против \vec{L} . Это значит, что проекция спина \vec{S} на это выделенное направление может принимать лишь два значения: $+\hbar/2$ и $-\hbar/2$, то есть $m_s\hbar$, где $m_s = \pm 1/2$. Орбитальный момент количества движения \vec{L} и спиновый \vec{S} складываются в полный механический момент импульса $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Проекция полного момента может принимать значения $m_J\hbar$, где $m_J = m_l + m_s = m_l \pm 1/2$, и называется квантовым числом полного момента. Отсюда следует, что определённые значения в одном и том же состоянии могут иметь квадрат полного момента \vec{J}^2 и одна из его проекций на координатные оси (например J_z). Тогда $\hat{J}^2\hat{J}_z = \hat{J}_z\hat{J}^2$, $\vec{J}^2 = \hbar^2 J(J+1)$, где J – максимальное число, которое может принимать квантовое число m_J . Поскольку максимальное число m_l равно l , то $J = l \pm 1/2$. При заданном числе J , возможно $2J+1$, отличающихся значениями m_J , то есть $m_J = -J, -(J-1), \dots, 0, \dots, +(J-1), J$. В спектроскопии вместо указанных выше квантовых чисел (n, l, J, m_s) принято пользоваться числами $n, l, J, 2S+1$ и заменять l соответствующей буквой латинского алфавита в соответствии с таблицей:

Кв. число l	0	1	2	3	4	5	6	7
Обозн.	s	p	d	f	g	h	i	k

Сначала пишут значение главного квантового числа n , за ним букву, заменяющую число l , затем число J пишут справа от этой буквы в виде нижнего индекса, а в качестве верхнего индекса слева от той же буквы пишут число $2S+1$, называемое мультиплетностью уровня. Данное число показывает: сколькими способами спин \vec{S} может ориентироваться относительно орбитального момента \vec{L} . Например, состояние $3^2S_{1/2}$ (три, дублет $S_{1/2}$) имеет $n = 3, l = 0, J = 1/2, S = 1/2$. Состояние (четыре, дублет $d_{3/2}$) имеет вид: $4^2d_{3/2}$. В этом состоянии $n = 4, l = 2, J = 3/2$, причём $J = l - 1/2$, то есть спиновый момент ориентирован против направления орбитального момента $S = 1/2$. Однако в состоянии $4^2d_{5/2}$, $J = l + 1/2$.

22. Периодическая система Д.И. Менделеева

Электроны в атоме разделяются на слои. Максимальное число электронов в слое (с учетом спина) находим по формуле $\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$.

Для слоев вводится буквенное обозначение в соответствии с правилом:

n	1	2	3	4	5	...
Слой	K	L	M	N	O	...
Максимальное число электронов	2	8	18	32	50	...

Совокупность электронов с заданными n и l образуют оболочку. Различные состояния в оболочке отличаются квантовым числом m_l . Так как $m_l = -l, \dots, -1, 0, +1, \dots, l$, то в оболочке с квантовым числом l может находиться не более $2(2l+1)$ электронов (с учетом спина), то есть:

l	0	1	2	3	4	...
Оболочка	s	p	d	f	g	...
Максимальное число электронов	2	6	10	14	18	...

Для полностью заполненной оболочки характерно равенство нулю суммарного орбитального и суммарного спинового моментов ($l=0, s=0$). Тогда полный момент импульса $j=0$. Таким образом, при определении l и s атома заполненные оболочки можно не принимать во внимание. В таблице заполнение слоев вместо значений $m_s = \pm 1/2$ принимаются следующие обозначения $\uparrow\downarrow$:

Слой	n	l	m_l	m_s	Оболочка
K	1	0	0	$\uparrow\downarrow$	$K(1s)$
L	2	0	0	$\uparrow\downarrow$	$L_1(2s)$
		1	-1	$\uparrow\downarrow$	$L_2(2p)$
			0	$\uparrow\downarrow$	
M	3	1	+1	$\uparrow\downarrow$	$M_2(3p)$
			0	$\uparrow\downarrow$	
			-1	$\uparrow\downarrow$	
		2	0	$\uparrow\downarrow$	$M_2(3d)$
			+1	$\uparrow\downarrow$	
		+2	$\uparrow\downarrow$		

Слой	n	l	m_l	m_s	Оболочка	
N	4	0	0	↑↓	$N_1(4s)$	
		1	-1	↑↓	$N_2(4p)$	
			0	↑↓		
			+1	↑↓		
		2	-2	↑↓	$N_3(4d)$	
				-1		↑↓
				0		↑↓
				+1		↑↓
				+2		↑↓
				+3		↑↓
		3	-3	↑↓	$N_4(4f)$	
				-2		↑↓
-1	↑↓					
0	↑↓					
+1	↑↓					
+2	↑↓					
+3	↑↓					

С помощью принципа Паули можно определить положение каждого электрона в атоме. Рассмотрим, например, лишнее электронов ядро неона ($Z=10$). Если оно приобретает один электрон, то последний быстро переходит на орбиталь с $n=1$. То же справедливо и для второго электрона. Оба эти электрона полностью заполняют слой K ($n=1$). Если теперь добавить остальные восемь электронов, то они полностью заполнят четыре возможные орбиты или слой L ($n=2$). Периодическая повторяемость свойств химических элементов, описанная Д.И. Менделеевым в 1869 г. и отражённая в его периодической системе, была объяснена Н. Бором в 1922 г. на основе созданной им теории атома. Оказалось, что не атомная масса, а заряд ядра атома лежит в основе систематики химических элементов. Тогда за основу принимают заряд ядра eZ , где Z – порядковый номер элемента в таблице Менделеева. Свойства элементов зависят, прежде всего, от числа электронов в электронной оболочке атома и от её строения. Химические свойства элементов определяются наружными электронами электронной оболочки. В естественном состоянии в природе встречается 90 элементов. Наибольший атомный номер $Z=92$ имеет уран (U). Элементы с атомным номером большим 92 называются трансуранными. Все они радиоактивны и получены искусственно. К настоящему времени получены элементы до 109 включительно. В атоме водорода имеется в основном состоянии один электрон. Квантовые числа атома: $L=0$, $S=1/2$, $J=1/2$. Основной терм: $^2S_{1/2}$. В атоме гелия 2 электрона. Электронная конфигурация: $1s^2$ (два $1s$ -электрона). Основной терм: 1S_0 , так как $L=0$, $S=0$, $J=0$. В атоме лития 3 электрона. Третий электрон занимает уровень $2s$. Электронная конфигурация: $1s^2 2s$. Основное состояние (терм): $^2S_{1/2}$, так как $L=0$, $S=1/2$, $J=1/2$. У четвертого элемента, бериллия, полностью заполняется оболочка $2s$. У последующих шести элементов (B, C, N, O, F, Ne) происходит заполнение электронной под-оболочки $2p$, в результате чего неон имеет полностью заполненный слой

(двумя электронами) и L (восемью электронами), образующие устойчивую систему, подобную гелию, то есть является также инертным газом. Одиннадцатый элемент, натрий, имеет кроме заполненных K и L слоёв, один электрон в оболочке $3s$. Электронная конфигурация имеет вид: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. Основной терм: $^2S_{1/2}$. Электрон $3s$ является валентным. Основное состояние оптического электрона характеризуется $n=3$. У следующих за натрием 7 элементов нормально заполняются оболочки $3s$ и $3p$. Заканчивается слой M . Подоболочка $3d$ оказывается энергетически выше у элементов: калий (K) и кальций (Ca) оболочки $4s$, в связи с чем, при незавершённом слое M , начинает заполняться слой N . Оболочка $4p$ лежит выше, чем оболочка $3d$, так что после $4s$ заполняется оболочка $3d$. С аналогичными отступлениями от обычной последовательности, повторяющимися время от времени, осуществляется застройка (всех) электронных уровней остальных атомов. При этом периодически повторяются сходные электронные конфигурации (например, $1s$, $2s$, $3s$, и т. д.) сверх полного заполнения оболочек. Этим обуславливается периодическая повторяемость химических и оптических свойств атомов.

МГТУ им. И. П. Шаманкина

23. Ионизационные потенциалы и другие свойства химических элементов от водорода (H) до натрия (Na)

$Z=1$ (водород)

Единственный электрон находится в состоянии с $n=1$, энергия которого равна $-13,6$ эВ. Таким образом, энергия связи или ионизации равна $13,6$ эВ. Электрон, разогнанный в электрическом поле $13,6$ В, может ионизовать атом.

$Z=2$ (гелий)

Рассмотрим вначале ион He^+ , состоящий из ядра гелия и одного электрона. Любое ядро с атомным номером Z и одним электроном аналогично атому водорода. Стоячие электронные волны сохраняют прежний вид, но полную энергию системы следует умножить на Z^2 , то есть

$$W_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} (\text{эВ}), r_n = 0,053 \frac{n^2}{Z} (\text{нм}). \quad (23.1)$$

В радиальной волновой функции постоянная $R_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2 / Zm_e e^2$, поэтому ионизированный потенциал He^+ равен $4 \cdot 13,6 \text{ В} = 54,4 \text{ В}$. Если в окрестности He^+ поместить второй электрон, то он первоначально «видит» заряд, равный $Z-1$. Однако после того как он попадает в оболочку (слой) с $n=1$, половину времени он будет находиться ближе к ядру первого электрона и будет «видеть» при этом заряд ядра Z . Если взять среднее из этих величин, то есть $\frac{Z-1+Z}{2} = Z - \frac{1}{2}$, то получим, что для электрона в атоме гелия эффективное зарядовое число равно $Z_{\text{эф}} = 1,5Z$. Обобщая формулу (23.1), получим:

$$W_n = -13,6 \frac{Z_{\text{эф}}^2}{n^2} (\text{эВ}), \quad (23.2)$$

где $Z_{\text{эф}} = f(n, l)$. Здесь учитывается центробежная энергия электрона.

Тогда ионизационный потенциал He равен $(1,5)^2 13,6 \text{ В} = 30,6 \text{ В}$. В действительности из-за наличия положительной потенциальной энергии, обусловленной отталкиванием электронов, ионизационный потенциал меньше и равен $24,6 \text{ В}$.

$Z=3$ (литий)

Дважды ионизованный литий Li^{++} имеет водородоподобный спектр, у которого энергия уровней в $(3)^2=9$ раз больше, чем у водорода. Спектр однократно ионизованного лития (Li^+) подобен спектру гелия но с $Z_{\text{эф}}=3-1/2$, а не $2-1/2$, как у гелия. В силу принципа Паули, третий электрон в Li должен находиться на оболочке (слое) с $n=2$. Для этого электрона $Z_{\text{эф}}$ будет несколько больше единицы ($Z_{\text{эф}} \geq 1$). Таким образом, ионизационный потенциал Li будет несколько больше, чем $13,6/n^2 = 13,6/2^2 = 3,4 \text{ В}$. Эксперимент даёт $5,4 \text{ В}$, что соответствует $Z_{\text{эф}}=1,25$.

Второй ионизационный потенциал, соответствующий удалению второго электрона, составляет 75,6 В. Таким образом, в соединениях литий будет обнаруживать валентность +1, то есть тенденцию терять один электрон, но не два. Почему внешний электрон Li для $n=2$ обладает квантовым числом $l=0$, а не $l=1$, хотя состояния с $n=2, l=0$ и $n=2, l=1$ должны иметь одну и ту же энергию? Состоянию с $l=0$ отвечает более сильная связь, чем состоянию с $l=1$, так как волновая функция с $l=0$ ($R_{2,0}$) концентрируется в центре ядра атома ($r=0$), а волновая функция с $l \geq 1$ при $r > 0$ ($R_{n,l} = 0$ при $l \neq 0$) на периферии атома.

Z=4 (бериллий)

Согласно Принципу Паули, в состоянии с $n=2, l=0$ могут находиться два электрона. Поскольку $Z_{эф}$ для близкой к ядру электронной волны оказывается большим, чем у лития, более высоким будет и ионизационный потенциал. Если у Li ионизационный потенциал 5,4 В, то у Be – 9,32 В. Однако второй ионизационный потенциал у Be не намного больше, так как второй электрон находится в состоянии с $n=2$. Поэтому в химических соединениях Be проявляет валентность +2.

Z=5 (бор), Z=6 (углерод), Z=7 (азот), Z=8 (кислород), Z=9 (фтор), Z=10 (неон).

Эти атомы образуются при заполнении состояний с $l=1$ в оболочке с $n=2$. Поскольку значению l отвечают три возможных значения m_l , на оболочке ($n=2, l=1$) могут разместиться 6 электронов. В состоянии с $n=2$ в атомах: бора, углерода и азота находятся соответственно три, четыре и пять электронов, что соответствует валентности +3, +4, +5. При химических связях все три последних элемента ведут себя одинаково.

Кислород и фтор обнаруживают новое явление, называемое «средство к электрону». Отдельный атом фтора может приобрести дополнительный электрон и превратиться в стабильный ион F⁻. Соответствующая этому электрону волна частично «видит» большой эффективный заряд $Z_{эф}$ и электрон оказывается связанным энергией 3,6 эВ. Таким образом, валентность фтора равна -1. Средство к электрону при образовании O⁻ составляет 2,2 эВ. В химических соединениях кислород и азот имеют валентности соответственно -2 и -3. У неона все состояния с $n=2$ заняты, то есть слой занят. Поскольку для Ne $Z_{эф} \approx 10$, то ионизационный потенциал 21,6 В. Неон также инертный газ.

От Z=11 (натрий) до Z=18 (аргон)

Согласно принципу Паули, одиннадцатый электрон натрия должен занять состояние с $n=3$, для которого $Z_{эф} \approx 1$ и которое отвечает электронной волне гораздо больших размеров, чем состояние неона с $n=2$. Следовательно, как только в заполнение электронами новых орбиталей вовлекается более высокий слой, объём атома значительно увеличивается. В последовательности из восьми элементов от Na до Ar заканчиваются оболочки с $n=3, l=0$ и $n=3, l=1$ и их заполнение происходит аналогично предыдущим восьми элементам. Поэтому химические свойства этих элементов очень схожи. В этом и состоит суть и объяснение периодической системы химических элементов.

24. Эффект Зеемана

Наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к тонкой структуре спектральных линий. Однако в отсутствие внешних полей все направления в пространстве эквивалентны, а потому энергетические уровни не зависят от магнитного квантового числа m_e , хотя при заданном полном механическом моменте атома J число m_J может принимать $2J+1$ значений. То есть кратность вырождений равна $2J+1$. Этим объясняется эффект Зеемана. Однако до открытия спина электрона квантовая механика объясняла лишь простой эффект Зеемана.

Полагается, что атом обладает магнитным моментом \vec{m} , поэтому его энергия в магнитном поле \vec{B} равна $W = W_0 - (\vec{m}\vec{B})$, где W_0 – энергия в отсутствие магнитного поля. Если нет спина, то магнитный момент атома обусловлен лишь орбитальным движением электронов. Его проекция на направление магнитного поля составляет целое число магнетонов Бора, то есть

$$m_L m_B = m_L \left(\frac{e\hbar}{2\mu_e} \right), \quad W = W_0 - m_L \left(\frac{e\hbar B}{2\mu_e} \right) = W_0 - \hbar \Omega m_L, \quad (24.1)$$

где $\Omega = eB/2\mu_e$ – частота Лармора. Каждый уровень распадается в магнитном поле на $2L+1$ подуровней. В результате квантовых переходов между различными уровнями излучаются спектральные линии с частотами $\omega = \omega_0 - \Omega \Delta m_L$, где $\omega_0 = \Delta W_0/\hbar$ – частота света, излучаемого в отсутствие магнитного поля. Вследствие правил отбора $\Delta m_L = 0$ или ± 1 . Таким образом, частота излучения равна ω_0 или $\omega_0 \pm \Omega$.

В соответствии с классической теорией имеет место лорентцевский триплет с π ($\Delta m_L = 0$) компонентой и двумя σ -компонентами ($\Delta m_L = \pm 1$).

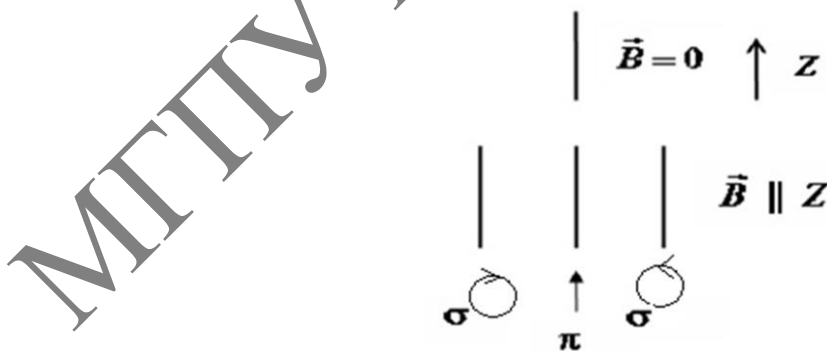


Рисунок 23 – Схема расщепления энергетических уровней в магнитном поле

Учет спина электрона позволяет объяснить сложный эффект Зеемана. В отсутствие магнитного поля общий механический момент \vec{J} сохраняется как по величине, так и по направлению. Моменты же \vec{L} и \vec{S} , из-за спин-

орбитального взаимодействия, не сохраняются (прецессируют во времени), однако сохраняются их длины ($\vec{L}, \vec{S}, \vec{J}$ – лежат в одной плоскости). С той же угловой скоростью будут прецессировать и соответствующие им магнитные моменты $\vec{m}_L = -g_L \vec{L}$ и $\vec{m}_S = -g_S \vec{S}$, а также общий магнитный момент $\vec{m} = -g_L \vec{L} - g_S \vec{S}$. Действительно, ввиду того, что $g_L \neq g_S$, вектор \vec{m} не коллинеарен вектору \vec{J} , потому также должен менять свое направление.

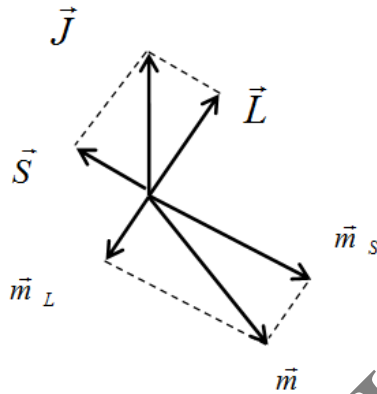


Рисунок 24 – Схема прецессирования механического и магнитного моментов атома

Проекция вектора $\vec{m}_{||}$ на направление вектора \vec{J} дается соотношением:

$$(\vec{m} \vec{J}) = -g \vec{J}^2. \quad (24.2)$$

Из формулы (24.2) следует, что проекция вектора \vec{m} на направление вектора \vec{J} имеет определённое значение, то есть

$$m_{||} = -g |\vec{J}|, \quad (24.3)$$

где для электрона

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

Величина g называется фактором Ланде. Основную роль в магнитных явлениях играет величина $m_{||} = \vec{m} = -g \vec{J}$. Именно этот эффект играет основную роль в опытах Штерна и Герлаха. Таким образом, например, дуплет натрия (589,6 нм, 589 нм) расщепляется в магнитном поле, соответственно на четыре и шесть линий.

25. Квантово-механическая теория излучения атома

Рассмотрим атом, который начиная с момента времени $t=0$ подвергается воздействию электромагнитной волны с силой

$$F = eE_{\omega}^0 \cos\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} z\right). \quad (25.1)$$

Схема взаимодействия электромагнитной волны с электроном атома представлена на рисунке 25.

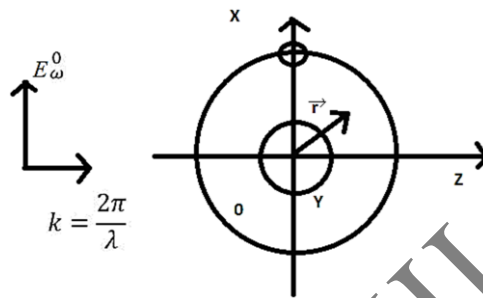


Рисунок 25 – Схема воздействия поля электромагнитной волны на электрон атома ($\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z$ – радиус-вектор электрона атома)

Так как размер атома $\sim 10^{-8}$ см, а длина электромагнитной волны $\sim 10^{-4}-10^{-5}$ см, то выполняется соотношение: $z/\lambda \ll 1$. Сила, действующая на электрон $F = eE_{\omega}^0 \cos(\omega t)$. Потенциальная энергия электрона в атоме дается соотношением:

$$U = -exE_{\omega}^0 \cos(\omega t). \quad (25.2)$$

Будем исходить из решения нестационарного волнового уравнения:

$$\hat{H}\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (25.3)$$

где гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}, \hat{U} = U(x, t). \quad (25.4)$$

Решение уравнения (25.3) ищем в виде:

$$\psi = \sum_k C_k(t) \psi_k. \quad (25.5)$$

Подставим (25.5) в (25.3), тогда получим:

$$\frac{dC_m}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_k C_k \int \psi_m^* \hat{U} \psi_k dV. \quad (25.6)$$

При выводе системы уравнений (25.6) использовалось свойство ортогональности собственных функций невозмущенной системы, то есть

$$\int \psi_m^* \psi_k dV = \delta_{mk}, \quad (25.7)$$

причем $\delta_{mk} = 1$ при $m=k$, $\delta_{mk} = 0$, при $m \neq k$.

Из системы уравнений (25.6) с бесконечным числом уравнений принципиально возможно вычислить коэффициенты C_1, C_2, C_3, \dots . Учитывая, что при $t=0$ система имеет определенное значение энергии W_n , можно положить $C_n=1$, считая, что атом находится в состоянии ψ_n . Тогда решение уравнения (25.6) имеет вид:

$$C_m(t) = \frac{E_\omega^0}{2\hbar} (ex_{mn}) \frac{(e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1)}{(\omega_{mn} - \omega)}. \quad (25.8)$$

Величина $|C_m|^2 = C_m^* C_m$ – характеризует вероятность перехода атома с уровня n на уровень m . Далее, следует учесть, что излучение не может быть строго монохроматическим, поэтому следует выполнить интегрирование величины $|C_m|^2$ по всему спектру частот $-\infty \leq \omega \leq \infty$. Интегрирование дает:

$$|\bar{C}_{mn}|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |C_{mn}|^2 d\omega = \frac{(E_\omega^0)^2 e^2 |x_{mn}|^2}{2\hbar^2} t. \quad (25.9)$$

Из выражения (25.9) следует, что вероятность перехода атома в единицу времени равна

$$W_t = \frac{d|\bar{C}_{mn}|^2}{dt} = \frac{(E_{\omega x}^0)^2 e^2 |x_{mn}|^2}{2\hbar^2}. \quad (25.10)$$

Движение осциллятора происходит в пространстве, то есть в системе координат X, Y, Z , поэтому, $|x_{mn}|^2 + |y_{mn}|^2 + |z_{mn}|^2 = 3|x_{mn}|^2 = |r_{mn}|^2$. Тогда выражение (25.10) обобщается на общий случай движения излучающего электрона атома в пространстве

$$W_t = \frac{(E_{\omega x}^0)^2 e^2 |r_{mn}|^2}{6\hbar^2}. \quad (25.11)$$

Известно, что при наличии квантовых переходов атом может как поглощать энергию излучения, так и излучать ее, переходя на более низкие энергетические уровни за счет индуцированного испускания.

В статистической теории излучения Эйнштейна вероятность перехода атома с уровня « n » на уровень « m » дается соотношением:

$$W_t = \bar{W}_\omega B_{mn} = \frac{3}{2} \varepsilon_0 \bar{E}_{\omega x}^2 B_{mn}, \quad (25.12)$$

B_{mn} – коэффициент индуцированного излучения Эйнштейна.

Приравнявая формулы (25.11) и (25.12), получаем

$$B_{mn} = \frac{e^2 |r_{mn}|^2}{9\hbar^2 \varepsilon_0} = \frac{|d_{mn}|^2}{9\hbar^2 \varepsilon_0}, \quad (25.13)$$

где d_{mn} – дипольный момент атома, соответствующий дипольному моменту, принятому в классической электродинамике. Аналогично этому для коэффициента Эйнштейна A_{mn} спонтанных переходов атома получаем выражение

$$A_{mn} = \frac{\omega^3 |d_{mn}|^2}{36\pi^2 c^2 \varepsilon_0 \hbar}. \quad (25.14)$$

Чтобы получить выражение для энергии излучения частоты ω , распространяющегося в пределах телесного угла $d\Omega$, необходимо (25.14) умножить на величину $2\pi\hbar\omega \frac{d\Omega}{4\pi}$. Тогда получим следующее выражение:

$$L_{\omega, \Omega} d\Omega = \frac{\omega^4 |d_{mn}|^2}{72\pi^2 \varepsilon_0 c^2} d\Omega. \quad (25.15)$$

Анализ спектров атомов и молекул показал, что в большинстве случаев действуют определенные «правила отбора». При этом допустимыми, то есть соответствующими реально наблюдаемым линиям спектра, оказываются лишь линии, соответствующие отдельным квантовым переходам; все остальные переходы «запрещены», то есть линии спектра, которые были бы обусловлены этими «запрещёнными» переходами, как правило, не наблюдаются. Квантовая механика показала, что эти правила отбора являются естественными следствиями свойств волновых функций. Приведем некоторые примеры:

1) Правила отбора для линейного гармонического осциллятора. Дипольные моменты для линейного гармонического осциллятора отличны от нуля, то есть

$$d_{mn} \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* x \psi_m dx \neq 0,$$

если $m = n \pm 1$, то есть разрешены переходы $n \rightarrow n+1$, $n \rightarrow n-1$. В линейном гармоническом осцилляторе переходы могут иметь место, лишь между соседними состояниями.

2) Электрон в центрально-симметричном поле. В этом случае выполняются два важных правила. Одно из них управляет переходами, связанными с изменением орбитального квантового числа l . Возможны лишь переходы, при которых ($d_{mn} \neq 0$), то есть

$$\Delta l = 0, \pm 1. \quad (25.16)$$

Второе правило для центрально-симметричного поля относится к магнитному квантовому числу m_l . При этом возможны лишь такие переходы, для которых

$$\Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (25.17)$$

МГТУ им. И. П. Шамякина

26. Электронный парамагнитный резонанс

Широкое распространение для обнаружения посторонних включений твердых тел получил метод магнитного резонанса, в котором используются макроскопические количества вещества в твердом, жидком или газообразном состоянии. Частица, магнитный момент которой ориентирован по полю, обладает меньшей энергией, чем такая же частица с магнитным моментом, ориентированным против поля. По формуле Больцмана, в состоянии равновесия число первых частиц будет больше, чем вторых. Иными словами, нижние подуровни зеемановского расщепления окажутся заселенными больше, чем верхние (рисунок 26).

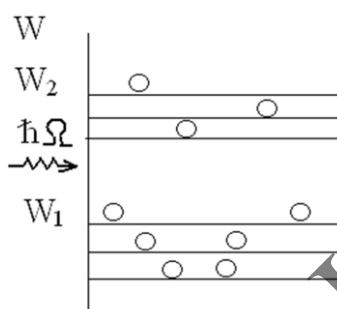


Рисунок 26 – Поглощение излучения при зеемановском расщеплении

Оценим разность заселенностей подуровней при комнатной температуре $T=293$ К в предположении, что магнитный момент частицы равен одному магнетону Бора, $m_B = 9,27 \times 10^{-21}$ эрг/Гс, а $B = 5 \cdot 10^3$ Гс. Если n_2 – число частиц на верхнем подуровне W_2 , а n_1 – на нижнем подуровне W_1 , то по формуле Больцмана

$$\frac{n_1}{n_2} = \exp\left(\frac{W_2 - W_1}{k_B T}\right) \approx 1 + \frac{W_2 - W_1}{k_B T} = 1 + \frac{2m_B B}{k_B T}$$

Так что

$$\frac{n_1 - n_2}{n_2} = \frac{2m_B B}{k_B T} = 2,3 \cdot 10^{-3}$$

Значит разность заселенностей двух соседних подуровней составляет 0,23 % от заселенности одного из этих подуровней.

В результате преобладающих переходов частиц с нижних уровней на верхние, энергии энергетических подуровней начнут выравниваться. Этому препятствуют релаксационные процессы, стремящиеся восстановить первоначальное равновесное состояние. Поэтому, чтобы магнитный резонанс был выражен достаточно резко, необходимо, чтобы период радиочастотных колебаний был мал по сравнению со временем релаксации, в течение которого восстанавливается равновесное состояние.

Электронный парамагнитный резонанс был открыт Е.К. Завойским в 1944 г. Его первые наблюдения были произведены на солях группы железа. В дальнейшем круг изучаемых веществ значительно расширился. Е.К. Завойский проводил свои исследования с радиоволнами дециметрового диапазона и длиной волны λ , определяемой по формуле:

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\Omega} = \frac{2\pi c}{g_{abc} B},$$

где $g_{abc} = g(e/m_e c)$, причем g – фактор Ланде, e (m_e) – заряд (масса) электрона, Ω – частота ларморовской прецессии. При этом использовалось магнитное поле индукции B небольшой величины. В связи с развитием техники ультракоротких волн позднее в методе ЭПР стали применять радиоволны сантиметрового диапазона.

В современных радиоспектроскопах частоту радиосигнала Ω поддерживают постоянной, а магнитное поле B модулируют сигналом низкой частоты (50 Гц). Схема радиоспектроскопа показана на рисунке 27. Электромагнит NS питается постоянным током и создает сильное постоянное магнитное поле. Это поле модулируется катушками KK , питаемыми переменным током с частотой 50 Гц. Исследуемый образец A объемом в несколько мм³ помещают в объемный резонатор R , настроенный на длину волны $\lambda \sim 3$ см. Электромагнитные волны такой длины генерируются отражательным клистроном и подводятся к резонатору R через волновод F . После частичного поглощения в образце A они, также через волновод, поступают к кристаллическому кремний-вольфрамовому детектору D , где детектируются и могут быть усилены. Парамагнитное поглощение может быть обнаружено, если детектор соединить с чувствительным гальванометром. Еще большая чувствительность достигается, если сигнал от детектора, переданный от усилителя Y , развернуть на экране осциллографа (не указанного на рисунке 27).

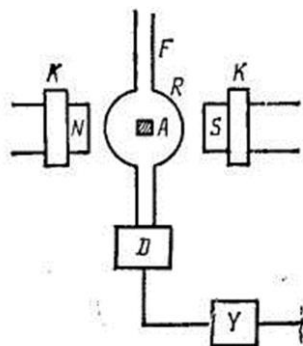


Рисунок 27 – Схема радиоспектроскопа (KK – катушка, питаемая переменным током частотой 50 Гц, A – образец, K – резонатор, F – волновод, D – детектор, Y – усилитель)

Список рекомендуемой литературы

1. Сивухин, Д.В. Общий курс физики. Атомная и ядерная физика / Д.В. Сивухин : в 5 т. – М. : Наука, 1980. – Т. 5. – 416 с.
2. Савельев, И.В. Курс общей физики / И.В. Савельев : в 3 т. – М.: Наука, 1976. – Т. 3. – 304 с.
3. Королев, Ф.А. Курс физики. Оптика. Атомная и ядерная физика / Ф.А. Королев. – М. : Просвещение, 1974. – 608 с.
4. Квасов, Н.Т. Физика атома / Н.Т. Квасов, Ю.И. Савилова, М.Ф. Санникович // Учебное пособие. – Минск : ИВЦ Минфин, 2014. – 207 с.
5. Оор, Дж. Физика / Дж. Оор : в 2 т. – М. : Мир, 1981. – 622 с.
6. Блохинцев, Д.И. Основы квантовой механики / Д.И. Блохинцев. – М. : Наука, 1983. – 664 с.

МГТУ ИМ. И. П. ШАМЯКИНА

Предметный указатель

Гиромагнитное отношение 43

Длина волны Комптона 6

Коэффициенты Эйнштейна 62

Магнетон Бора 44

Магнитный момент атома 43

Постулаты Бора 10

Правило частот Бора 11

Принцип Паули 28

Принцип Ритца 7

Распределение Гаусса 22

Серия Бальмера 9

Серия Лаймана 9

Терм спектральный 7

Туннельный эффект 36

Уравнение Шредингера 23

Фактор Ланде 60

Частота Лармора 59

Энергия гармонического осциллятора 31

Эффект Зеемана 59

Эффект Комптона 5

Справочное издание

**ФИЗИКА АТОМА
И АТОМНЫХ ЯВЛЕНИЙ**

Справочник

для студентов специальности 1-31 04 08 03 «Компьютерная физика.
Компьютерное моделирование физических процессов»

Составитель

Кулак Геннадий Владимирович

Корректор *Т. И. Татарина*

Оригинал-макет *Е. В. Северин*

Дизайн обложки *Л. В. Ключкова*

Иллюстративный материал на первой странице обложки заимствован из общедоступных Интернет-ресурсов, не содержащих ссылок на авторов этих материалов и ограничения на их заимствование.

Подписано в печать 13.12.2022. Формат 60x84 1/16. Бумага офсетная.
Ризография. Усл. печ. л. 3,66. Уч.-изд. л. 4,00. Тираж 69 экз. Заказ 38.

Издатель и полиграфическое исполнение:
учреждение образования «Мозырский государственный
педагогический университет имени И. П. Шамякина».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,
распространителя печатных изданий N 1/306 от 22 апреля 2014 г.

Ул. Студенческая, 28, 247777, Мозырь, Гомельская обл.

Тел. (0236) 24-61-29.