

Владимирский государственный университет

Л. В. ФУРОВ

**ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ
И АТОМНОЙ ФИЗИКИ**

Учебно-практическое пособие

Владимир 2025

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

Л. В. ФУРОВ

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И АТОМНОЙ ФИЗИКИ

Учебно-практическое пособие

Электронное издание



Владимир 2025

ISBN 978-5-9984-2189-1

© ВлГУ, 2025

УДК 53
ББК 22.3

Рецензенты:

Доктор физико-математических наук, профессор
профессор кафедры общей физики и микроэлектроники
Ярославского государственного университета им. П. Г. Демидова
С. О. Ширяева

Доктор физико-математических наук, доцент
профессор кафедры физики и прикладной математики
Владимирского государственного университета
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых
А. О. Кучерик

Издается по решению редакционно-издательского совета ВлГУ

Фуров, Л. В. Основы квантовой механики и атомной физики [Электронный ресурс] : учеб.-практ. пособие / Л. В. Фуров ; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2025. – 148 с. – ISBN 978-5-9984-2189-1. – Электрон. дан. (5,93 Мб). – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). – Систем. требования: Intel от 1,3 ГГц ; Windows XP/7/8/10 ; Adobe Reader ; дисковод CD-ROM. – Загл. с титул. экрана.

Содержит материал по разделам физики «Квантовая механика», «Физика твердого тела», «Атомное ядро». Включает шесть тем. Ориентировано на формирование у студентов знаний в области общей физики. Дидактический материал издания позволяет проконтролировать усвоение теоретического материала, необходимого для решения задач по каждой теме.

Предназначено для студентов вузов инженерно-технических направлений подготовки всех форм обучения.

Рекомендовано для формирования профессиональных компетенций в соответствии с ФГОС ВО.

Ил. 66. Табл. 1. Библиогр.: 19 назв.

ISBN 978-5-9984-2189-1

© ВлГУ, 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
Тема 1. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И АТОМНОЙ ФИЗИКИ.....	6
1.1. Корпускулярные свойства волн	6
1.2. Основы квантовой механики	18
Тема 2. АТОМ ВОДОРОДА.....	48
Тема 3. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ.....	68
Тема 4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ	85
Тема 5. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФЕРМИ	94
Тема 6. ЭЛЕМЕНТЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ	102
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	118
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	119
ПРИЛОЖЕНИЕ	122

ВВЕДЕНИЕ

В учебно-практическом пособии рассматриваются основы квантовой механики и атомной физики. В конце XIX века еще ничего не было известно об атомном ядре, так как атом считали мельчайшей неделимой частицей вещества. Открытие в 1895 году рентгеновских лучей и в 1896 году – естественной радиоактивности показало, что в устройстве атомов всех элементов есть общие черты. Опыты Генриха Герца, Александра Столетова, Петра Лебедева доказали квантовый характер поведения фотона. В 1904 году английский физик Томсон предложил первую модель атома, в соответствии с которой атом представлял собой положительно заряженный шар со взвешенными внутри него электронами. Дальнейшее развитие модели атома предложил Эрнест Резерфорд. Согласно ей атом состоял из центрального положительно заряженного ядра с распределенными вокруг него на относительно больших расстояниях ($\approx 10^{-8}$ см) электронами. Ядерная модель атома хорошо объясняла результаты опытов по изучению рассеяния α -частиц. Она напоминала по своему устройству Солнечную систему, в связи с этим по аналогии ее стали называть планетарной. Однако данная модель противоречила двум существенным экспериментальным результатам – устойчивости атомов и дискретному характеру атомных спектров. Это обстоятельство заставило Нильса Бора в 1913 году создать квантовую теорию атомных процессов. Предложив свои постулаты, позднее ставшие знаменитыми, он отказался от привычных классических представлений, что привело к правильному описанию внутриатомных процессов.

Старая модель атома была заменена новой, в ней положение электрона в атоме в данный момент времени определяется не точно, а с некоторой вероятностью, которая задается волновой функцией, являющейся решением волнового уравнения. Квантовая механика не только подтвердила все результаты теории Н. Бора, но и объяснила, почему атом не излучает в стационарном состоянии. Квантовая механика дала

объяснение совершенно непонятному с точки зрения классической физики явлению дифракции электронов.

Открытие нейтрона привело к гипотезе о протон-нейтронном строении ядра, которая полностью разрешила трудности протон-электронной модели и в настоящее время является общепринятой. Протон-нейтронную модель предложили советские ученые Е. Н. Гапон и Д. Д. Иваненко и независимо от них немецкий физик В. Гейзенберг. В соответствии с этой моделью все ядра состоят из двух видов элементарных частиц, называемых нуклонами, – протонов и нейтронов. Различные ядра, включая полученные искусственно, которых насчитывается около двух тысяч, отличаются числом составляющих их нейтронов и протонов.

К настоящему времени создана и развивается не только теория атомного ядра, но и такая отрасль экономики, как ядерная энергетика. Основные объекты в этой отрасли прежде всего атомные электростанции, в том числе плавучие, атомные ледоколы и подводные лодки (АПЛ) и т. п. Современное развитие атомной энергетики нацелено в том числе на решение проблемы управляемого термоядерного синтеза.

Изучение основ ядерной физики необходимо для студентов технических специальностей различного профиля. Это увеличивает кругозор будущих специалистов и повышает уровень их знаний.

Тема 1. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И АТОМНОЙ ФИЗИКИ

1.1. Корпускулярные свойства волн

Теоретический материал

Внешний фотоэффект и его законы. Фотоны. Уравнение Эйнштейна для внешнего фотоэффекта. Многофотонный эффект. Масса и импульс фотона. опыты Лебедева. Квантовое и волновое объяснение давления света. Эффект Комптона и его теория. Диалектическое единство корпускулярных и волновых свойств электромагнитного излучения.

Внешний фотоэффект и его законы. Фотоны. Уравнение Эйнштейна для внешнего фотоэффекта. Многофотонный эффект. Явление внешнего фотоэффекта было открыто в 1887 году немецким физиком *Генрихом Герцем* (1857 – 1894). Он заметил, что электрический разряд между двумя электродами происходит сильнее (или при меньшем напряжении), если искровой промежуток (электроды) освещается светом, богатым ультрафиолетовыми лучами. Величина искрового промежутка F подбирается таким образом, что в схеме (рис. 1.1),

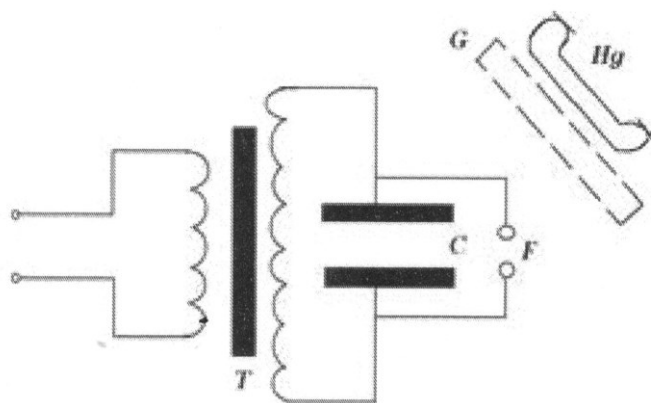


Рис. 1.1

состоящей из трансформатора T и конденсатора C , искра проскакивает с трудом (один-два раза в минуту). Если осветить электроды F , сделанные из чистого цинка, светом ртутной лампы Hg , то разряд конденсатора значительно облегчается: искра начинает проскакивать гораздо чаще.

Потеря металлическими телами электрического заряда при освещении их лучами света получила название **фотоэлектрического эффекта**, или просто **эффекта** (греч. фотос – «свет»; лат. эффект – «действие»).

В 1888 году опыты в этом направлении были продолжены профессором Московского университета уроженцем г. Владимира *Александром Григорьевичем Столетовым* (1839 – 1896). Он провел исследования по испусканию электронов веществом под действием света. Самая примечательная работа Столетова, доставившая ему мировую известность, – исследование фотоэлектрического эффекта, которое он проводил у себя в лаборатории с 1888 по 1890 год. Чтобы по достоинству оценить подвиг ученого, достаточно сказать, что в то время еще не был открыт электрон, а также не существовало теории, объясняющей электрический ток в металлах и газах как движение электронов и ионов.

Установка, с помощью которой Столетов производил экспериментальное исследование фотоэффекта, показана на рис. 1.2.

Сплошную пластинку К (алюминиевую, медную, цинковую, серебряную, никелевую) и тонкую сетку А закрепляли на некотором расстоянии друг от друга и соединяли с полюсами источника тока.

Цинковую пластинку освещали со стороны сетки светом, который свободно проникал через нее. Когда сплошную пластинку присоединяли к отрицательному полюсу источника тока, т. е. когда она становилась катодом, появлялся ток. Можно сделать вывод, что электрическая цепь в этом

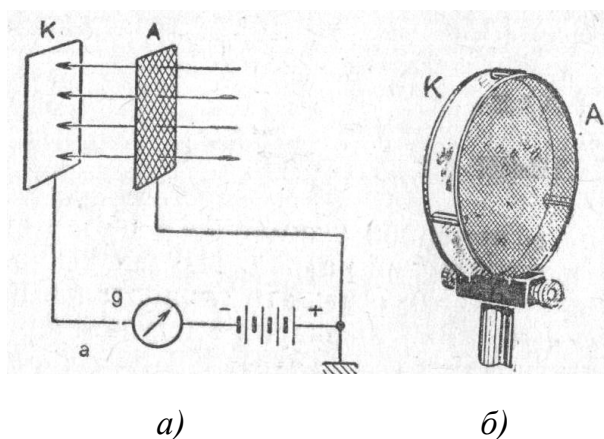


Рис. 1.2

опыте замыкается отрицательно заряженными частицами, вырывающимися из освещенной пластинки под действием электрического поля. А. Г. Столетов установил, что если цинковая обкладка конденсатора соединена с отрицательным полюсом источника напряжения (является катодом), то гальванометр, включенный в цепь, показывает ток. Если же катодом является сетка, то ток отсутствует. Значит, освещенная цинковая пластинка испускает отрицательно заряженные частицы, которые и обуславливают существование тока между этой пластинкой и сеткой. Позднейшими опытами (Дж. Дж. Томсона, А. Ф. Иоффе), в которых измеряли заряд испускаемых под действием света частиц, было установлено, что эти частицы – электроны.

Поток электронов, испускаемых катодом под действием света, носит название **фотоэлектрического тока**, или **фототока**. На рис. 1.3 показана зависимость силы фототока от приложенного напряжения. Сила фототока с увеличением напряжения, поданного к фотоэлементу, растет до известного предела I_0 , после чего при дальнейшем увеличении напряжения остается неизменной. Предельную величину фототока

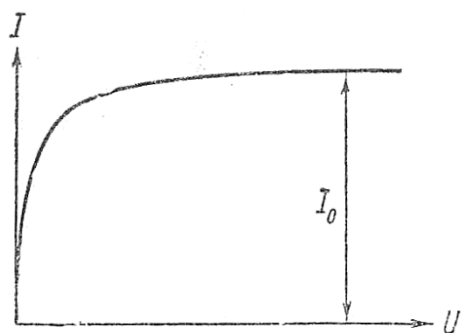


Рис. 1.3

называют **фототоком насыщения**. При малом напряжении вылетевшие из катода электроны лишь частично летят к аноду, а частично возвращаются на катод. По мере увеличения напряжения, поданного к фотоэлементу, количество улетающих к аноду электронов увеличивается — увеличивается сила фототока. При достижении некоторой величины напряжения все вылетающие из катода

электроны устремляются к аноду, и фототок достигает насыщения. Исследуя зависимость фототока насыщения от величины светового потока, падающего на катодную пластинку, А. Г. Столетов установил следующий фундаментальный закон: величина фототока насыщения прямо пропорциональна падающему на металлическую пластинку световому потоку. Этот закон носит название *закона Столетова*. Ученый опубликовал его в работе «Актино-электрические исследования».

Последующие эксперименты показали, что фототок представляет собой поток электронов, вырванных светом из металла. Явление фотоэффекта нашло широкое практическое применение. Приборы, в основе устройства которых лежит явление фотоэффекта, называют **фотоэлементами**. Фотоэлементы применяют в фотореле, фотодатчиках и многих других приборах. Преимущество фотоэлементов перед другими системами автоматического регулирования в их безынерционности.

А. Г. Столетов разработал метод наблюдения фотоэлектрических явлений, применяющийся и в наше время. И сейчас удивляет простота и огромная точность этого метода. Он заключается в следующем. Одну полированную цинковую пластинку конденсатора соединяют через гальванометр с отрицательным полюсом батареи. Положительный полюс присоединяют к другой пластинке, имеющей форму металлической сетки. Сквозь сетку пластинка конденсатора освещается лучами электрической дуги.

В настоящее время известно, что свет электрической дуги выбивает из цинковой пластинки электроны, они летят к положительно заряженной сетке, и поэтому через гальванометр течет электрический фототок. А. Г. Столетов, ничего не зная об электронах, опытным путем установил следующие закономерности фототока.

1. Лучи, идущие от электрической дуги на отрицательно заряженную пластинку цинка, вырывают из нее электрический заряд, который попадает на сетку и создает в цепи электрический ток. Такое «унесение» заряда происходит только с отрицательной пластинки. С положительной пластинки заряд лучами не уносится.

2. Если тело не было предварительно заряжено электричеством, то под действием лучей электрической дуги оно зарядится положительно.

3. Разряжающим действием обладают не все лучи. Наиболее сильным разряжающим действием обладают лучи, имеющие самую короткую длину волны. Чем больше таких лучей в спектре электрической дуги, тем сильнее их фотоэлектрическое действие.

4. Все металлы обладают почти одинаковым фотоэффектом, но остальные тела реагируют на лучи света по-разному. Особенно значителен фотоэффект у некоторых красящих веществ (анилиновых красок).

5. Фототок следует мгновенно за освещением. А. Г. Столетов установил отсутствие инерции фототока с точностью до одной тысячной доли секунды. В настоящее время это явление проверено с точностью до одной трехмиллиардной доли секунды.

6. Разряжающее действие пропорционально энергии активных лучей, падающих на поверхность пластинки.

7. Фотоэффект возрастает с повышением температуры разряжаемой пластинки.

Большинство закономерностей, выведенных А. Г. Столетовым, по мере развития науки были неоднократно подтверждены и сыграли большую роль в теоретической физике. Они стали основой современного учения о фотоэлектричестве и технике фотоэлементов, имеющего широкое применение в нашем народном хозяйстве и во многих областях науки.

Таким образом, опытным путем установлены следующие законы фотоэффекта.

1. Сила фототока насыщения прямо пропорциональна падающему на катод фотоэлемента световому потоку, т. е. прямо пропорциональна силе света источника света.

2. Наибольшая скорость вылета освобождаемых электронов не зависит от силы света, а для данного металла катода зависит исключительно от длины волны падающего на катод света: чем короче волна, т. е. чем больше частота колебаний, тем больше скорость вылета электронов.

Эти законы хорошо объясняются квантовой теорией света. Световой квант, для того чтобы выбить электрон из катода, должен иметь энергию, достаточную, во-первых, для «вырывания» электрона из металла; во-вторых, для сообщения вылетевшему электрону кинетической энергии, соответствующей скорости его движения. Следовательно, для вылета электрона с той или иной скоростью необходимо, чтобы

$$h \cdot \nu = A_{\text{вых}} + \frac{mv_{\text{э}}^2}{2},$$

где $h \cdot \nu$ – энергия светового кванта падающего света; $A_{\text{вых}}$ – работа выхода этого электрона; m – масса электрона; $v_{\text{э}}$ – скорость выбитого электрона.

Эта формула Эйнштейна (1905 год) получила впоследствии блестящее подтверждение в опытах Милликена (1916 год) и Лукирского (1928 год). Из формулы Эйнштейна следует, что, для того чтобы осуществить фотоэлектронную эмиссию, частота падающего света должна удовлетворять неравенству

$$h \cdot \nu \geq A_{\text{вых}}.$$

В предельном случае – нулевой скорости выбитого электрона ($v_{\text{э}} \approx 0$)

$$h \cdot \nu_0 = A_{\text{вых}}.$$

При частоте падающего света меньше ν_0 фотоэффекта не произойдет. Число электронов, которые вырываются из металла в единицу времени, зависит от интенсивности световой волны, т. е. от количества квантов света частотой ν , падающих на поверхность металла в единицу времени.

Более детальные исследования фотоэффекта были проведены на установке, схема которой представлена на рис. 1.4. Электроды А и К через потенциометр П подключены к источнику ЭДС Е. Напряжение между электродами, называемое анодным, измеряется вольтметром V , а ток в цепи – гальванометром Г. Если пластинка К не освещается, то

ток в цепи отсутствует, так как вакуумный промежуток между катодом и анодом тока не проводит. Если исследуемую пластинку осветить светом через окно С, то свет вырвет из пластинки электроны, которые получили название *фотоэлектронов*. Под действием электрического поля, созданного анодным напряжением, фотоэлектроны будут двигаться к аноду А и далее по замкнутой цепи через гальванометр Г к катоду К. Гальванометр покажет наличие тока, который получил

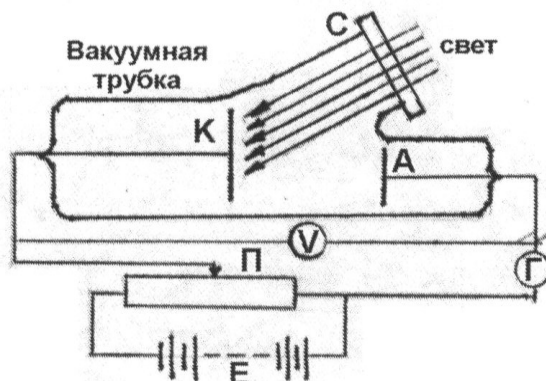


Рис. 1.4

название *фототока*. При помощи потенциометра П можно изменять величину и знак анодного напряжения. Следует иметь в виду, что ток в цепи существует и в том случае, когда анодное напряжение равно нулю, и даже при небольшом отрицательном (задерживающем) напряжении. Объясняется это тем, что вылетевшие из катода фотоэлектроны обладают кинетической энергией, за счет которой совершается работа против сил поля и они достигают анода. Изучая зависимость фототока, возникающего при облучении металла потоком монохроматического света, от разности потенциалов между электродами (такую зависимость называют вольт-амперной характеристикой фототока), установили следующее (рис. 1.5).

1. Фототок возникает не только при $U_A - U_K = 0$, но и при $U_A - U_K < 0$.

2. Фототок отличен от нуля до строго определенного для данного металла отрицательного значения разности потенциалов $U_A - U_K = U_3$, так называемого *задерживающего потенциала*.

3. Величина запирающего (задерживающего) потенциала не зависит от интенсивности падающего света.

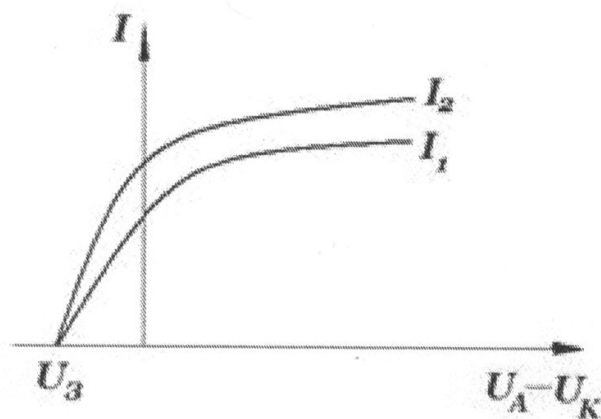


Рис. 1.5

4. Фототок растет с уменьшением абсолютного значения задерживающего потенциала.

5. Величина фототока увеличивается с ростом $U_A - U_K$, и с какого-то определенного значения $U_A - U_K$ фототок (так называемый *ток насыщения*) становится постоянным.

6. Величина тока насыщения растет с увеличением интенсивности падающего света.

7. Величина задерживающего потенциала зависит от частоты падающего света.

8. Скорость вырванных под действием света электронов не зависит от интенсивности света, а зависит только от его частоты.

Масса и импульс фотона. Опыты Лебедева. Квантовое и волновое объяснение давления света. Известно, что энергия фотона (кванта света) может быть определена как

$$W_\phi = h \cdot \nu.$$

Кроме энергии фотон обладает также массой и импульсом. Масса фотона может быть определена из формулы, выражающей взаимосвязь массы и энергии в теории относительности,

$$m = \frac{h \cdot \nu}{c^2}.$$

Отличие массы фотона от массы макроскопических тел и некоторых элементарных частиц заключается в том, что фотон не имеет массы покоя m_0 . Фотон всегда в любом веществе движется со скоростью $\nu = c$, так как при $\nu \neq c$ масса и энергия фотона были бы равны нулю, что противоречит вышеприведенной формуле. Этот вывод не противоречит тому, что фазовая и групповая скорости света отличны от скорости света c в вакууме. Это связано с тем, что распространение света в среде сопровождается процессами «переизлучения»: фотоны поглощаются и вновь испускаются частицами среды.

Импульс фотона p_ϕ и его энергия W_ϕ в соответствии с общей формулой теории относительности связаны соотношением

$$W_\phi = c \cdot \sqrt{p_\phi^2 + m_0^2 \cdot c^2}.$$

$$\text{Для фотона масса покоя } m_0 = 0 \text{ и } p_\phi = \frac{W_\phi}{c} = \frac{h \cdot \nu}{c} = m \cdot c.$$

Если ввести волновое число $k = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda}$, то вышеприведенное выражение можно видоизменить

$$p_{\phi} = h \frac{\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot k = \hbar \cdot k,$$

где $\hbar = \frac{h}{2 \cdot \pi} = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с.

Направление импульса совпадает с направлением распространения света, характеризуемым волновым вектором \vec{k} , численно равным волновому числу.

Итак, фотон обладает энергией, массой и импульсом подобно любой движущейся частице или телу. Все эти три корпускулярные характеристики фотона связаны с волновой характеристикой света – его частотой ν .

Экспериментальным подтверждением наличия у фотонов импульса служит существование светового давления. С квантовой точки зрения давление света обусловлено тем, что при соударении с поверхностью каждый фотон передает ей свой импульс. Фотон может двигаться только со скоростью света в вакууме. Поэтому отражение света от поверхности тела следует рассматривать как сложный процесс «переизлучения» фотонов: падающий фотон поглощается поверхностью, а затем вновь излучается ею с противоположным направлением импульсов. При этом давление света на отражающую поверхность должно быть таким же, каким оно было бы в том случае, если бы фотоны зеркально отражались от поверхности.

Определим световое давление, которое оказывает на поверхность тела поток монохроматического излучения, падающего перпендикулярно поверхности. Пусть в единицу времени на единицу площади поверхности тела падает n фотонов. Если коэффициент отражения света от поверхности тела равен R , то Rn фотонов отражается, а $(1 - R)n$ поглощается. Каждый отраженный фотон передает стенке импульс

$$2 \cdot p_{\phi} = \frac{2 \cdot h \cdot \nu}{c}.$$

Каждый поглощенный фотон передает стенке свой импульс

$$p_{\phi} = \frac{h \cdot \nu}{c}.$$

Таким образом, давление света на поверхность, равное импульсу, который передают поверхности за 1 с все n фотонов, определится как

$$p_{\phi} = \frac{2 \cdot h \cdot \nu}{c} \cdot R \cdot n + \frac{h \cdot \nu}{c} (1 - R) \cdot n.$$

Эту формулу можно преобразовать

$$p_{\phi} = \frac{n \cdot h \cdot \nu}{c} \cdot (1 + R) = \frac{I}{c} (1 + R) = w \cdot (1 + R),$$

где $I = n \cdot h \cdot \nu$ – интенсивность света; $w = \frac{I}{c}$ – объемная плотность энергии падающего излучения.

Эта формула подтверждается экспериментальными результатами, полученными русским физиком-экспериментатором *Петром Николаевичем Лебедевым* (1866 – 1912) в 1899 году. Опыты Лебедева – прямое подтверждение электромагнитной теории света.

Итак, по современным квантовым представлениям, свет или любое излучение – поток фотонов, энергия которых связана с частотой электромагнитных волн. Свет представляет собой диэлектрическое единство противоположностей – волновых и корпускулярных свойств. Следовательно, **фотон** – «частица» электромагнитного излучения, имеющая определенную частоту, движущаяся со скоростью света и, следовательно, по теории относительности не имеющая массу покоя.

Эффект Комптона и его теория. В 1922 году американский физик *Артур Комптон* (1892 – 1962) открыл явление изменения длины волны рентгеновского излучения вследствие рассеяния последнего электронами вещества. Это стало прямым доказательством существования фотона. При наблюдении рассеяния монохроматического рентгеновского излучения графитом, парафином и другими веществами Комптон обнаружил, что длина волны λ' рассеянного излучения больше длины волны λ падающего излучения, причем разность $\lambda' - \lambda$ зависит только от угла рассеяния ϑ

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2 \cdot \lambda_k \cdot \sin^2(\vartheta/2),$$

где λ_k – комптоновская длина волны. Это явление получило название *эффекта Комптона*.

На рис. 1.6 представлена схема опыта Комптона. Источник рентгеновского излучения (РИ), не проходя через диафрагму, попадает на рассеивающее вещество (РВ), и часть отклонившегося излучения регистрируется рентгеновским спектрометром (РС). С квантовой точки зрения рассеяние света, как и фотоэффект, – результат взаимодействия фотонов падающего на вещество излучения с электронами этого вещества. При этом взаимодействии должны выпол-

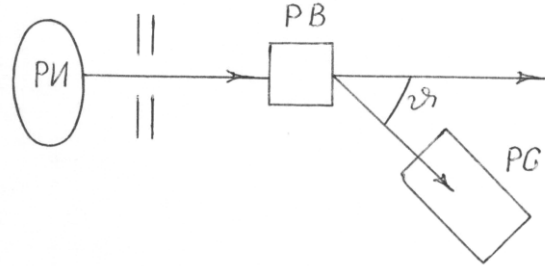


Рис. 1.6

няться законы сохранения энергии и импульса в системе «вещество – излучение», которую можно считать изолированной. Если предположить, что фотон падает на свободный электрон вещества и поглощается им, то одновременно

$$(m - m_0) \cdot c^2 = h \cdot \nu, \quad m \cdot v = h \cdot \nu / c.$$

Первое уравнение выражает закон сохранения энергии, второе – закон сохранения импульса. Здесь m и v – масса и скорость электрона после поглощения фотона, m_0 – масса покоя электрона. Из специальной теории относительности масса m тела зависит от значения его скорости \vec{V} относительно инерциальной системы отсчета

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}},$$

где m_0 – масса рассматриваемого тела при $v = 0$, т. е. измеренная в инерциальной системе отсчета, относительно которой это тело неподвижно (другими словами, масса покоя). Таким образом, выражения для энергии и импульса можно переписать в виде

$$m \cdot c^2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}} - 1 \right) = h \cdot \nu, \quad \frac{m_0 \cdot v}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}} = \frac{h \cdot \nu}{c}.$$

Эти два равенства не могут выполняться одновременно при произвольных значениях v , отличных от 0 и ∞ . Таким образом, фотоэлектрическое поглощение света свободными электронами невозможно, так как оно противоречит законам сохранения энергии и импульса.

Для рассеяния света на электронах вещества условие связанности электронов не является обязательным, поэтому рассеяние света может происходить и на свободных электронах легких веществ (парафина, графита и т. д.).

В результате несложных преобразований для эффекта Комптона формулу можно переписать в виде

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2 \cdot \frac{h}{m_0 \cdot c} \cdot \sin^2(\vartheta/2).$$

Из этой формулы видно, что увеличение длины волны при эффекте Комптона зависит только от угла рассеяния ϑ . Наибольшее увеличение длины волны происходит при $\vartheta = \pi$, т. е. в случае, когда фотон рассеивается в сторону, противоположную первоначальному направлению его движения.

Следует отметить, что $\Delta\lambda$ не зависит от длины волны падающего света и свойств рассеивающего вещества. Таким образом, комптоновская длина волны $\lambda_k = \frac{h}{m_0 \cdot c} = 2,42621 \cdot 10^{-12}$ м. В некоторых случаях

применяется также величина $\frac{\lambda_k}{2 \cdot \pi} = \frac{\hbar}{m_0 \cdot c}$ м.

Диалектическое единство корпускулярных и волновых свойств электромагнитного излучения. Такие явления, как фотоэффект и эффект Комптона, служат доказательством квантовых (корпускулярных) представлений о свете как о потоке фотонов. Такие явления, как интерференция, дифракция и поляризация света, подтверждают волновую (электромагнитную) природу света. Давление и преломление света объясняются как волновой, так и квантовой теорией. Таким образом, электромагнитное излучение обнаруживает удивительное единство, казалось бы, взаимоисключающих свойств – непрерывных (волны) и дискретных (фотоны), которые дополняют друг друга.

Детальное рассмотрение оптических явлений приводит к выводу, что свойства непрерывности, характерные для электромагнитного поля световой волны, не следует противопоставлять свойствам дискретности, характерным для фотонов. Свет, обладая одновременно корпускулярными и волновыми свойствами, обнаруживает определенные закономерности в их проявлении. Например, волновые свойства света про-

являются в закономерностях его распространения, интерференции, дифракции, поляризации, а корпускулярные – в процессах взаимодействия с веществом. Чем больше длина волны, тем меньше энергия и импульс фотона и тем труднее обнаруживаются квантовые свойства. Яркий пример этого – существование «красной границы» фотоэффекта. И наоборот, чем меньше длина волны, тем больше энергия и импульс фотона и тем труднее обнаруживаются волновые свойства света (например, волновые свойства (дифракция) рентгеновского излучения обнаружены лишь после применения дифракционной решетки кристаллов).

Взаимосвязь между двойственными корпускулярно-волновыми свойствами света можно объяснить, если использовать, как это делает квантовая оптика, статистический подход к рассмотрению закономерностей распространения света. Так, например, дифракция света на щели состоит в том, что происходит перераспределение фотонов в пространстве. Поскольку вероятность попадания фотонов в различные точки экрана неодинакова, то возникает дифракционная картина. Освещенность экрана пропорциональна вероятности попадания фотонов на единицу площади экрана. С другой стороны, в соответствии с волновой теорией освещенность пропорциональна квадрату амплитуды световой волны в той же точке экрана. Следовательно, квадрат амплитуды световой волны в данной точке пространства – мера вероятности попадания фотонов в данную точку.

Таким образом, корпускулярно-волновой дуализм не только физическая, но и философская категория поведения материи.

Тестовые вопросы и задачи

Задание 1. Поясните опыты А. Г. Столетова и их физический смысл.

Задание 2. Что такое работа выхода электрона?

Задание 3. Поясните вольт-амперные характеристики при фотоэффекте.

Задание 4. Дайте квантовое и волновое объяснение давлению света. Каков его физический смысл?

Задание 5. Каково отличие характера взаимодействия света при фотоэффекте и эффекте Комптона?

Задание 6. Фотоны с энергией 8,4 эВ вырывают из металлической пластины электроны с максимальной кинетической энергией, равной 7,2 эВ, а фотоны с энергией в два раза меньшей – электроны с максимальной кинетической энергией, равной:

- 1) 1,2 эВ; 2) 2,4 эВ; 3) 3,0 эВ; 4) 4,2 эВ.

Задание 7. Фотоны с частотой ν вырывают электроны из металлической пластины с работой выхода $A = 3, 4$ эВ. Если максимальная кинетическая энергия вылетевшего электрона $E = 3, 7$ эВ, то частота ν равна:

- 1) $1,0 \cdot 10^{15}$ Гц; 2) $1,7 \cdot 10^{15}$ Гц; 3) $2,0 \cdot 10^{15}$ Гц; 4) $2,8 \cdot 10^{15}$ Гц.

Задание 8. Фотоны с частотой $\nu = 1,5 \cdot 10^{15}$ Гц вырывают электроны из металлической пластины. Если максимальная кинетическая энергия вылетевшего электрона $E = 2$ эВ, то работа выхода равна

- 1) 3,5 эВ; 2) 3,6 эВ; 3) 3,8 эВ; 4) 4,2 эВ.

Задание 9. Определите максимальную скорость фотоэлектронов, вырываемых с поверхности цинка светом с длиной волны $\lambda = 0,25$ мкм.

- 1) $1,5 \cdot 10^5$ м/с; 2) $3,5 \cdot 10^5$ м/с; 3) $5,0 \cdot 10^5$ м/с; 4) $6,5 \cdot 10^5$ м/с.

Задание 10. При столкновении с релятивистским электроном фотон, обладающий энергией покоя электрона, рассеялся под углом 60° , а электрон остановился. Определите комптоновское смещение длины волны рассеянного кванта.

- 1) $1,0 \cdot 10^{-6}$ м; 2) $1,2 \cdot 10^{-6}$ м; 3) $1,5 \cdot 10^{-6}$ м; 4) $2,0 \cdot 10^{-6}$ м.

1.2. Основы квантовой механики

Теоретический материал

Затруднения классической электродинамики при объяснении строения атома. Волны де Бройля. Соотношение неопределенностей. Функция состояния. Уравнение Шрёдингера. Движение свободной частицы. Линейный гармонический осциллятор. Ротатор. Вращательно-колебательный спектр молекул.

Затруднения классической электродинамики при объяснении строения атома. Известно, что в теории Бора о строении атома для объяснения устойчивости атомов пришлось постулировать стационарные орбиты электронов. Это позволило правильно рассчитывать спектральные линии. Однако нужно отметить, что при движении по орбите

электрон испытывает нормальное ускорение и должен был бы излучать электромагнитные волны. При излучении он терял бы энергию и в конце концов упал бы на ядро. В действительности атомы устойчивы (время их существования беспретельно). Такое глубокое противоречие теории опыту требовало фундаментального изменения представлений механики о микроявлениях. Необходимо было найти условия, вытекающие из самой природы явлений микромира, определяющие устойчивость электрона.

Опыты Герца, теория Максвелла и даже величина давления света, полученная в 1901 году П. Н. Лебедевым, подтвердили электромагнитную теорию света. Только триумф теории был неполным.

Например, формула Рэлея – Джинса для плотности энергии излучения абсолютно черного тела

$$u_{\nu T} = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} k T$$

с точки зрения классической физики безупречна, но противоречит опыту в области ультрафиолетового излучения. Здесь c – скорость света; ν – частота излучения; k – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура.

В 1901 году немецкий физик *Макс Планк* (1858 – 1947) вывел формулу для плотности энергии равновесного излучения абсолютно черного тела, совпадающую с результатами опыта,

$$u_{\nu T} = \frac{8\pi \nu^3 h}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Эта формула справедлива, если принять, что свет излучается квантами $E = h \cdot \nu$, где $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж · с – постоянная Планка. Введением квантования при излучении Планк устранил так называемую ультрафиолетовую катастрофу. Ультрафиолетовая катастрофа заключается в том, что полная мощность теплового излучения любого нагретого тела в соответствии с законом Рэлея – Джинса должна быть бесконечной, т. е. спектральная плотность энергии излучения должна была бы неограниченно расти по мере сокращения длины волны.

Эти обстоятельства потребовали создания новой теории, которая правильно отражала бы законы микромира и плавно переходила бы в

классическую механику и электродинамику, так как формула Планка переходит в формулу Рэлея – Джинса при $h \cdot \nu \ll k T$.

Альберт Эйнштейн (1879 – 1955) в 1905 году распространил формулу энергии кванта на излучение. Поскольку свет излучается квантами, то он должен распространяться также квантами. Эйнштейн приписал корпускулярные свойства самому электромагнитному излучению.

Таким образом, была выдвинута гипотеза о том, что излучение имеет двойственный характер (обладает дуализмом): оно может рассматриваться как волна и как частица в зависимости от условий. Когда речь идет об интерференции, дифракции, поляризации, свет проявляет волновые свойства, а когда о взаимодействии света с веществом (например, о фотоэффекте) – корпускулярные свойства.

Волны де Бройля. Французский физик *Луи де Бройль* (1892 – 1987) в 1923 году распространил идею А. Эйнштейна о двойственной природе света на вещество, предположив, что поток материальных частиц должен обладать и волновыми свойствами, однозначно связанными с массой и энергией, т. е. движение частицы де Бройль сопоставил с распространением волны. При этой гипотезе с любой материальной частицей (электроном, протоном, нейтроном и др.) должен быть связан некоторый волновой процесс, частота которого может быть определена из соотношений $E = h \cdot \nu$ и $E = m \cdot c^2$,

$$\nu = \frac{m \cdot c^2}{h}, \quad (1.1)$$

а длина волны

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.2)$$

где p – импульс частицы.

Таким образом, движение частицы описывается:

1) уравнениями

$$E = h\nu \text{ и } p = \frac{h}{2\pi} k, \quad (1.3)$$

где $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число (число волн, приходящееся на 2π единиц длины, или в векторной форме

$$\vec{p} = \frac{h}{2\pi} \vec{k},$$

где \vec{k} – волновой вектор, совпадающий по направлению с импульсом частицы и по модулю равный волновому числу);

2) уравнением волны

$$\psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)}.$$

Используя выражения $\omega = 2 \cdot \pi \cdot \nu$, (1.1) – (1.3), получим уравнение волны де Бройля

$$\psi(x, t) = A e^{-i \frac{2\pi}{h}(Et - px)}.$$

Известно, что фазовая скорость определяет скорость фронта волны. **Фронтом волны** называют геометрическое место точек среды, для которых в данный момент времени фаза волны имеет одно и то же значение. Поверхность равных фаз волны де Бройля определяется из условия

$$E \cdot t - p \cdot x = c = const,$$

откуда
$$x = \frac{E \cdot t - c}{p}.$$

Скорость перемещения этой поверхности (фазовая скорость)

$$v_{\phi} = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p}.$$

Из этого выражения следует, что при увеличении частицы вдвое фазовая скорость увеличивается в $\sqrt{2}$ раз. Таким образом, изменение энергии частицы приводит к изменению фазовой скорости волн де Бройля, т. е. волны де Бройля должны испытывать дисперсию даже в вакууме.

Любая реальная волна представляет собой совокупность монохроматических волн, частоты которых мало отличаются от некоторой основной частоты ν . Такую волну называют **группой волн**. Для примера рассмотрим простейшую группу волн, состоящую из двух монохроматических волн,

$$S_1 = A \cdot \sin \frac{2\pi}{h}(E_1 \cdot t - p_1 \cdot x),$$

$$S_2 = A \cdot \sin \frac{2\pi}{h}(E_2 \cdot t - p_2 \cdot x).$$

Результирующая волна

$$S = S_1 + S_2 = 2A \cdot \cos \frac{2\pi}{h}(\Delta E \cdot t - \Delta p \cdot x) \sin \frac{2\pi}{h}(E \cdot t - p \cdot x),$$

где $\Delta E = \frac{E_2 - E_1}{2}$; $\Delta p = \frac{p_2 - p_1}{2}$; $E = \frac{E_1 + E_2}{2}$; $p = \frac{p_1 + p_2}{2}$.

Таким образом, результирующая волна плоская, но амплитуда ее не постоянна, а зависит от координаты и времени и представляет собой волну амплитуды, фаза которой

$$\varphi = \frac{2\pi}{h} (\Delta E \cdot t - \Delta p \cdot x) = \text{const.}$$

Групповой скоростью волны называют скорость распространения энергии волны, которая пропорциональна квадрату амплитуды волны. Следовательно, групповая скорость равна скорости перемещения поверхности с максимальной плотностью энергии и совпадает с фазовой скоростью волны амплитуды, т. е. групповая скорость определяется из условия

$$\frac{2\pi}{h} (\Delta E \cdot t - \Delta p \cdot x) = c = \text{const.},$$

откуда находим

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{dE}{dp},$$

где E – энергия частицы; p – ее импульс.

В случае свободной частицы

$$E = \frac{m \cdot v^2}{2} = \frac{p^2}{2m}, u = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = v.$$

Групповая скорость волн де Бройля равна скорости движения свободной частицы. Тогда появляется возможность интерпретировать материальную частицу как волновой пакет, образованный суперпозицией некоторой группы электромагнитных волн. Однако такое представление наталкивается на непреодолимые трудности. Например, вследствие дисперсии волн де Бройля в вакууме составляющие волновой пакет (материальную частицу) монохроматические волны разной частоты будут двигаться с разными скоростями и волновой пакет начнет быстро расплываться, что противоречит устойчивости материальных частиц.

Оценим длину волн де Бройля для электронов.

Пусть электрон ускоряется полем с разностью потенциалов U . В этом поле электрон приобретает энергию

$$\frac{m \cdot v^2}{2} = e \cdot U.$$

Из уравнения выразим скорость электронов

$$v = \sqrt{\frac{2e \cdot U}{m}}.$$

Учитывая уравнение (1.2), найдем длину волны

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m \cdot e}} \cdot \frac{1}{\sqrt{U}}.$$

Подставив константы, определим

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{U}} = \frac{1,23 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{U}} \text{ м} = \frac{12,3}{\sqrt{U}} \text{ \AA}.$$

Если разность потенциалов в электронных приборах порядка $1 - 10^4$ В, тогда, подставив в формулу, найдем $\lambda = 10 - 1 \text{ \AA}$, т. е. полученная длина волны сравнима с длиной волны рентгеновских лучей.

Существование волн де Бройля может быть установлено лишь на основании опытов, характерных для волновых процессов, – интерференции, дифракции.

Дифракционная картина получается просто, когда размеры неоднородностей, на которых происходит дифракция, не слишком велики по сравнению с длиной волны. Естественные кристаллы имеют расстояние между атомными плоскостями порядка нескольких ангстрем, т. е. близкое по величине к длине волны де Бройля для электрона.

Этот факт использовали американские физики *Клинтон Дэвиссон* (1881 – 1958) и *Лестер Джермер* (1896 – 1971) в 1927 году для наблюдения дифракции электронов от кристаллов как от пространственной дифракционной решетки по аналогии с дифракцией рентгеновских лучей. Схема эксперимента представлена на рис. 1.7.

Электроны, испускаемые раскаленной вольфрамовой нитью К, ускоряются разностью потенциалов U , приложенной между нитью и анодом А. Часть электронов проходит через узкую щель в аноде и попадает на кристалл никеля (Ni) под углом φ ; гальванометр G в цепи коллектора – цилиндра Фарадея F – измеряет ток I электронов, идущих от кристалла в направлении зеркального отражения. Отражение пучка по де Бройлю должно иметь место лишь в случае, если угол φ , межплоскостное расстояние d в кристалле и длина

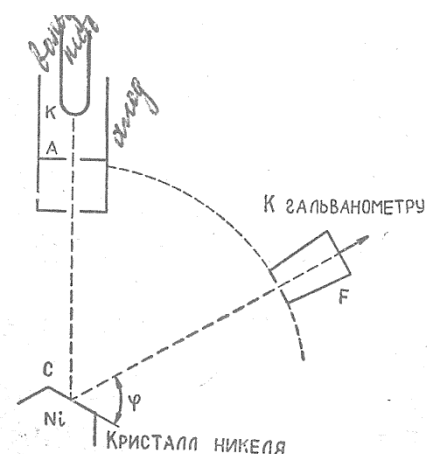


Рис. 1.7

волны де Бройля λ удовлетворяют условию Вульфа – Брегга (из дифракции рентгеновских лучей)

$$\sqrt{U} = \frac{h}{2d \cdot \sin \sqrt{2e \cdot m}}. \quad (1.4)$$

Результаты измерений зависимости силы тока I от \sqrt{U} представлены на рис. 1.8.

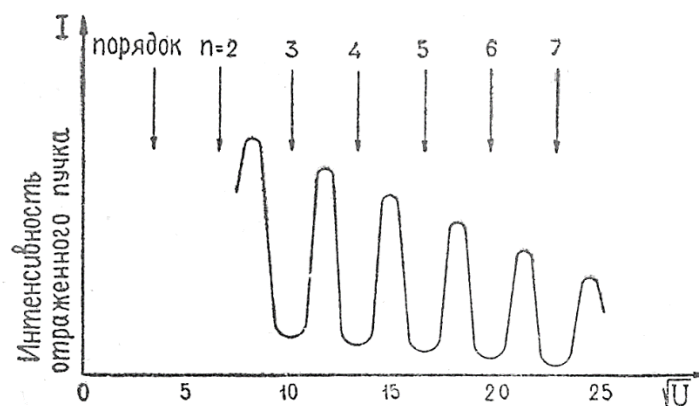


Рис. 1.8

Оказалось, что максимумы тока I соответствуют разности потенциалов, рассчитанных по формуле (1.4).

В 1928 году *Виктор Константинович Тартаковский* в СССР и *Джордж Томсон* (1892 – 1975) – в Англии получили дифракционные картины для электронов, пропуская узкий пучок катодных лучей через тонкие пленки веществ. После прохождения через пленку пучок электронов попадал на фотопластинку (рис. 1.9). Изображение на фотопластинке состояло из серии четких concentric circles around a central spot (рис. 1.10).

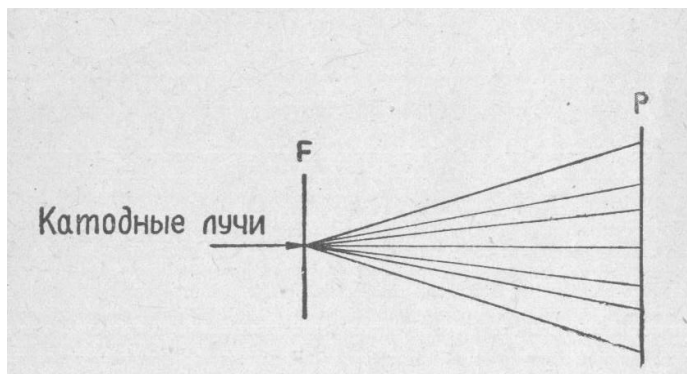


Рис. 1.9

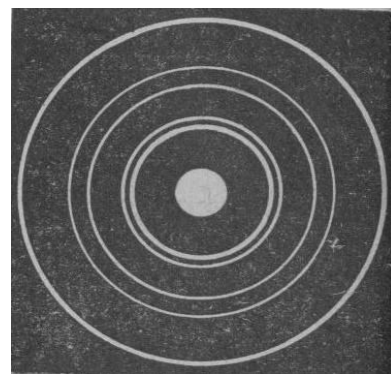


Рис. 1.10

Длина волны, связанная с электроном, удовлетворяла условию Вульфа – Брэгга. Таким образом, эти опыты подтвердили волновую природу электронов, а также применимость для них формулы де Бройля.

В 1929 году опытами немецких физиков *Отто Штерна* (1888 – 1969) и *Иммануэля Эстермана* (1900 – 1975) было впервые экспериментально доказано, что дифракция свойственна и атомным пучкам нейтральных атомов и молекул, а позднее – и нейтронам.

Проблема дуализма, возникшая при рассмотрении природы света, распространилась и на микрочастицы.

Соотношение неопределенностей. Рассмотрим в качестве примера дифракцию электронов на узкой щели. Предположим, что на щель шириной a , параллельную оси OZ , падает в направлении оси OY поток электронов со скоростью v (рис. 1.11).

Из опыта по дифракции известно, что в результате прохождения пучка электронов через щель справа от нее пучок перестает быть параллельным оси OY .

Место прохождения электрона через щель остается неизвестным, и поэтому неопределенность в координате равна ширине щели $\Delta x = a$.

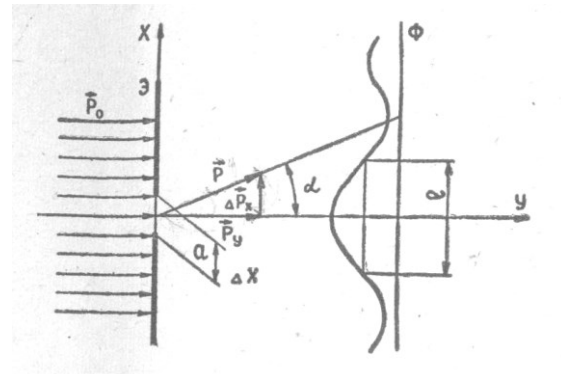


Рис. 1.11

Отклонение электрона вверх или вниз означает, что к его импульсу p_y добавляется импульс Δp_x . Из рис. 1.11 видно, что

$$\Delta p_x = p_y \cdot \sin \alpha.$$

Если применить условие первого дифракционного минимума от одной щели, то получим

$$\Delta x \cdot \sin \alpha = \lambda, \text{ или } \Delta x \cdot \sin \alpha = \frac{h}{p_y}.$$

Из этих выражений найдем $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$.

Из опытов следует, что электрон может попадать и в места на экране, соответствующие второму, третьему и так далее максимумам, поэтому произведение $\Delta x \cdot \Delta p_x$ будет больше, чем h , т. е.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h. \quad (1.5)$$

Если рассматривать движение частицы вдоль осей OY и OZ , то аналогичным образом получим

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq h, \Delta z \cdot \Delta p_z \geq h. \quad (1.6)$$

Эти формулы называют *соотношениями Гейзенберга* (в честь немецкого физика Вернера Гейзенберга (1901 – 1976)). Здесь $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – интервалы координат, в которых может быть локализована частица, описываемая волной де Бройля; $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ – интервалы по осям OX, OY, OZ , в которых заключены проекции импульса частицы.

Из соотношения неопределенности видно, что точное измерение импульса ($\Delta p_x = 0$) приводит к ошибке в координате $\Delta x \rightarrow \infty$ и, наоборот, точное знание координаты ($\Delta x = 0$) – к ошибке в импульсе $\Delta p_x \rightarrow \infty$. Из этих соотношений также следует, что в силу волновых свойств частицы одновременное знание координаты и ее импульса не имеет смысла. Поэтому они получили название *соотношений неопределенности*.

Кроме координат и сопряженных с ними импульсов все другие сопряженные пары физических величин (например, энергия и время) связаны соотношением неопределенности аналогичного вида. Так, соотношение неопределенностей для энергии и времени имеет вид

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h.$$

Здесь ΔE – неопределенность в значении энергии E ; Δt – время, в течение которого микрочастица обладает энергией $E + \Delta E$. Например, в возбужденном состоянии атом находится $\tau = 10^{-8}$ с. Тогда

$$\Delta E = \frac{h}{\Delta t} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-8}} = 6,62 \cdot 10^{-26} \text{ Дж} \approx 4 \cdot 10^{-7} \text{ эВ}.$$

При переходе атома из возбужденного состояния в стационарное будет излучаться не спектральная линия строгой частоты, а спектральная полоса $\Delta \nu$, называемая *естественной шириной спектральной линии*,

$$\Delta \nu = \frac{E}{h} = 10^8 \text{ с}^{-1}.$$

В классической механике с понятием движения по траектории неизбежно связано предположение о существовании у частицы в каждый момент времени определенной координаты, например x , и определенного импульса Δp_x .

Для того чтобы рассмотреть движение микрочастицы, обратимся к описанным опытам по дифракции частиц. Если под λ понимать именно длину волны де Бройля, то, какова бы ни была природа волн, эта величина не может быть функцией координат; следовательно, и импульс частицы не зависит от координат, поэтому говорить о траектории микрочастицы нет смысла: микрочастица не имеет траектории так же, как дифрагирующий свет не распространяется по лучам.

Следует отметить, что в камере Вильсона, электронном микроскопе, электронно-лучевой трубке движение электрона рассчитывается по законам классической физики и это не приводит к противоречиям.

Возникает вопрос, в каких же случаях понятие траектории имеет смысл? Рассмотрим следующие примеры.

1. Электрон в атоме водорода. Координата электрона задается с точностью до размеров диаметра атома, т. е. $\Delta x = 10^{-10}$ м. Неточность величины скорости определяется из соотношения неопределенности

$$\Delta v = \frac{h}{m \cdot \Delta x} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} \approx 7 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

Скорость движения электрона в атоме водорода находится из условия

$$\frac{m \cdot v^2}{r} = \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2}$$

или

$$v = \frac{e}{2 \cdot \sqrt{\pi \cdot \epsilon_0 \cdot m \cdot r}} = 1,59 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

Неопределенность скорости сравнима с самой скоростью. Таким образом, электрон в атоме нельзя рассматривать как обычную классическую частицу. В этом случае лишены смысла понятия «траектория в атоме», «путь перехода из одного энергетического состояния в другое».

2. Электрон в камере Вильсона. Допустим, что в камере Вильсона след электрона имеет толщину 10^{-4} м, а энергия электрона $E = 1,6 \times 10^{-16}$ Дж.

Неопределенность скорости в поперечном направлении

$$\Delta v_{\perp} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-4} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} \approx 7 \text{ м/с.}$$

Скорость движения в продольном направлении

$$\Delta v_{\parallel} = \sqrt{\frac{2 \cdot E}{m}} ; \Delta v_{\parallel} = \sqrt{\frac{2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-16}}{9,1 \cdot 10^{-31}}} = 2 \cdot 10^7 \text{ м/с.}$$

Неопределенность скорости в поперечном направлении много меньше скорости в продольном движении, а потому роли никакой не играет, и траектория электрона приобретает смысл.

Из этих и аналогичных примеров следует: понятие траектории имеет смысл, когда $\Delta p_x \ll p_x, \Delta p_y \ll p_y, \Delta p_z \ll p_z$.

Функция состояния. В классической физике состояние частицы определяется значением координат и импульса одновременно. Для микрочастицы одновременное знание координат и импульса невозможно. Понятие состояния из классической механики не подходит для микрочастицы. Ее состояние определяется иначе.

В 1949 году советские физики *Л. М. Биберман* (1915 – 1998) и *В. А. Фабрикант* (1907 – 1991) наблюдали дифракцию поочередно летящих электронов. Опыты заключались в следующем. Электроны рассеивались кристаллом по одному, и каждый рассеянный электрон фиксировался фотопластинкой. Когда число электронов, рассеянных кристаллом, было невелико, распределение точек попаданий электронов на пластинку казалось беспорядочным (рис. 1.12, а). После рассеяния очень большого числа электронов обнаружилось, что точки попадания на пластинку образуют максимумы интенсивности, положения которых могут быть рассчитаны по дифракционным формулам (рис. 1.12, б). Поскольку электроны рассеивались и фиксировались поодиночке, можно считать, что движение каждого электрона определяется полной дифракционной картиной.

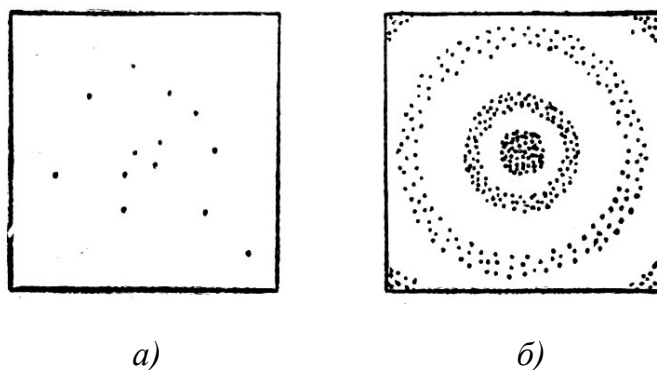


Рис. 1.12

Явление дифракции света наблюдается потому, что складываются амплитуды волн. Там, где фазы совпадают, интенсивность пропорциональна квадрату амплитуды и максимальна; там, где фазы волн противоположны, интенсивность минимальна. Почернение фотопластинки в местах попадания электронов пропорционально интенсивности волн де Бройля.

В опытах Бибермана и Фабриканта наблюдалось попадание электронов в различные точки, разбросанные по всему экрану. Указать заранее, в какую точку экрана попадает каждый отдельно взятый электрон, невозможно (хотя известно, куда он не попадет и куда может попасть). Таким образом, можно говорить только о вероятности попадания электрона в то или иное место.

Это приводит к тому, что интенсивность волн де Бройля следует рассматривать как плотность вероятности. Тогда вероятность попадания в объем dV равна

$$dw(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz.$$

Волну де Бройля чаще называют функцией состояния, или волновой функцией, или пси-функцией.

Описание частицы ψ -функцией не является неполным, незавершенным способом описания ее движения. Было бы неправильно думать, что возможна другая, более точная теория, при помощи которой можно находить лучшую траекторию частицы. Здесь дело в том, что микрочастица не есть частица в классическом смысле слова. Волновые свойства неотъемлемо присущи ей.

Функция $\psi(x, y, z, t)$ должна удовлетворять условию нормировки

$$\int_{(V)} |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1,$$

это означает, что вероятность нахождения частицы в выбранном объеме равна единице, т. е. наличие частицы в данном объеме есть достоверный факт.

Функция ψ должна удовлетворять условию однозначности, поскольку состояние микрочастицы в данной точке и в данный момент однозначно. Волновая функция $\psi(x, y, z, t)$ описывает состояние микрочастицы в любой точке и в любой момент времени, а значит, непрерывна.

Условие нормировки требует конечности волновой функции.

Уравнение Шрёдингера. Движение свободной частицы. Вид волн де Бройля (функция $\psi(x, y, z, t)$), описывающих состояние микрочастицы, для различных силовых полей различен. Волновое уравнение для функции состояния

$$\frac{d^2 S}{dx^2} + \frac{d^2 S}{dy^2} + \frac{d^2 S}{dz^2} = \frac{1}{v^2} \cdot \frac{d^2 S}{dt^2},$$

где S – волновая функция для любого волнового процесса; v – скорость распространения волны.

Это уравнение называют *волновым уравнением*. Например, в случае электромагнитных волн $S(x, y, z, t)$ может представлять одну из составляющих электрических или магнитных векторов волны.

Для получения уравнения функции $\psi(x, y, z, t)$ воспользуемся уравнением волны, но вместо скорости распространения волны подставим в уравнение фазовой скорости де Бройля частицы

$$v_{\phi}^2 = \frac{E^2}{p^2} = \frac{h^2 \cdot v^2}{m^2 \cdot v^2}.$$

Найдем

$$m^2 \cdot v^2 = \frac{m v^2}{2} \cdot 2 m = K.$$

Здесь K – кинетическая энергия частицы.

Кинетическая энергия $K = E - U$, где E – полная энергия; U – потенциальная энергия. Отсюда найдем

$$v_{\phi}^2 = \frac{h^2 \cdot v^2}{2 \cdot m \cdot (E - U)}.$$

Подставив v_{ϕ} в уравнение волны, получим

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{d^2 \psi}{dy^2} + \frac{d^2 \psi}{dz^2} = \frac{2 \cdot m \cdot (E - U)}{h^2 \cdot v^2} \cdot \frac{d^2 \psi}{dt^2}. \quad (1.7)$$

Решениями этого уравнения (ψ -функции) оказываются гармонические функции времени. Поскольку гармоническая функция может быть выражена через $\sin \frac{2\pi}{h} \cdot E \cdot t$, или $\cos \frac{2\pi}{h} \cdot E \cdot t$, или их комбинацию в виде экспоненциальной функции $e^{-i \frac{2\pi}{h} \cdot E \cdot t}$ (здесь $i = \sqrt{-1}$), то волновую функцию можно представить в виде произведения двух функций

$$\psi(x, y, z, t) = u(x, y, z) \cdot e^{-i \frac{2\pi}{h} \cdot E \cdot t}. \quad (1.8)$$

Подставив волновую функцию (1.8) в уравнение (1.7), получим

$$\frac{d^2 u(x, y, z)}{dx^2} + \frac{d^2 u(x, y, z)}{dy^2} + \frac{d^2 u(x, y, z)}{dz^2} = - \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m \cdot (E - U)}{h^2} \cdot u(x, y, z).$$

Это уравнение называют *законом движения микрочастиц для стационарных состояний*. Оно было получено в 1926 году австрийским физиком Эрвином Шрёдингером (1887 – 1961) и носит его имя.

Уравнение Шрёдингера занимает в квантовой механике такое же место, как закон Ньютона – в классической. В классической механике, зная условия, в которых находятся частица и силы, действующие на

нее, с помощью второго закона Ньютона можно описать состояние частицы – траекторию, импульс. В квантовой же механике условия, в которых находится микрочастица, задаются характером ее потенциальной энергии $U(x, y, z, t)$ и на основании решения уравнения Шрёдингера с помощью ψ -функции полностью описывается ее состояние.

Справедливость уравнения Шрёдингера может быть проверена рассмотрением на его основе движения микрочастицы в конкретных условиях (системах) и сравнением полученных результатов с опытами.

Отличие уравнения Шрёдингера от уравнений Ньютона в том, что первое – дифференциальное уравнение в частных производных. Поэтому в квантовой механике существует очень узкий круг задач, решаемых в аналитическом виде до конца, но имеются методы, с помощью которых можно оценивать результат и в тех случаях, когда точное решение не может быть получено.

Движение свободной частицы. Рассмотрим движение свободной частицы вдоль оси OX . Для свободной частицы потенциальная энергия $U(x, y, z) = 0$. Тогда уравнение Шрёдингера примет вид

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k^2 \cdot u(x) = 0, \quad (1.9)$$

где

$$k^2 = -\frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E. \quad (1.10)$$

Решение этого уравнения

$$u(x) = A \cdot e^{ikx} + B e^{-ikx}. \quad (1.11)$$

Заменив k на выражение (1.3) и умножив (1.11) на $e^{-i\frac{2\pi}{h}Et}$, получим волну де Бройля – волновую функцию для свободной частицы

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et - px)} + B e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et + px)}. \quad (1.12)$$

Уравнение (1.12) выражает суперпозицию двух плоских гармонических волн, распространяющихся в противоположные стороны. Для частицы, движущейся в положительном направлении оси OX ,

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et - px)};$$

для частицы, движущейся в противоположном направлении,

$$\psi(x, t) = B e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et + px)}.$$

Энергия частицы из выражения (1.10)

$$E = -\frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m} \cdot k^2. \quad (1.13)$$

Поскольку на k никакие ограничения не накладывались, то энергия свободной частицы в соответствии с выражением (1.13) может принимать любое значение. Между энергией E и k существует параболическая зависимость.

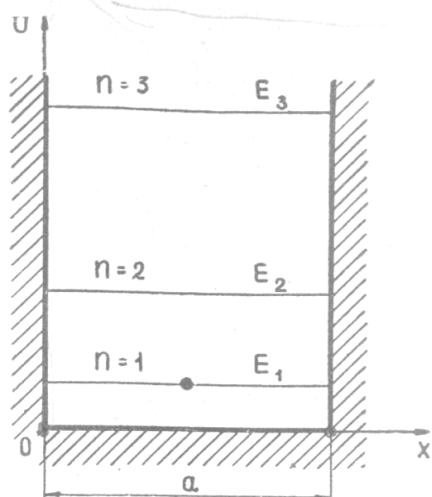


Рис. 1.13

Рассмотрим движение частицы вдоль оси Ox в ограниченной области. Положим, что потенциальная энергия частицы $U(x)$ равна нулю на отрезке $0 < x < a$, а при $x \geq a$ и $x \leq 0$ равна бесконечности (рис. 1.13). Это значит, что при подходе частицы к «стенкам» ($x = 0$ и $x = a$) на нее действуют бесконечно большие силы, не позволяющие пройти через стенку.

В соответствии с законами классической механики частица двигалась бы с любой постоянной скоростью от одной стенки до другой, упруго отскакивая от них. В момент отражения скорость менялась бы на противоположную.

Однако уравнение Шрёдингера (1.9) для движения частицы внутри ямы дает совсем другой результат

$$u(x) = A \cdot \sin(kx + \delta). \quad (1.14)$$

Функция $u(x)$ должна удовлетворять граничным условиям, т. е. при $x = 0$ и $u(0) = 0$, при $x = a$ и $u(a) = 0$.

Подставим граничные условия в выражение (1.14):

$$u(0) = A \cdot \sin \delta = 0;$$

$$u(a) = A \cdot \sin(ka + \delta) = 0.$$

Из первого условия найдем $\delta = 0$, так как $A \neq 0$. Из второго условия $\sin ka = 0$. Это возможно только когда $\sin ka = \pi n$, откуда

$$k = \frac{\pi n}{a}, \quad (1.15)$$

где $n = 1, 2, 3 \dots$

При $n = 0$ функция $u(0)$ тождественно обращается в нуль, тогда

$$u(x) = A \cdot \sin \frac{\pi n}{a} x.$$

Постоянную A найдем из условия нормировки

$$\int_0^a |u(x)|^2 dx = 1,$$

откуда $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Окончательно имеем

$$u(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin \frac{\pi n}{a} x.$$

Проанализируем полученный результат. Энергию E частицы найдем из выражений (1.10) и (1.15)

$$E = \frac{h^2}{8m \cdot a^2} n^2.$$

Из этого выражения можно сделать следующие важные выводы.

1. Поскольку $n \neq 0$, то энергия частицы не может принимать значение, равное нулю, т. е. частица не может находиться в состоянии покоя.

2. Частица в потенциальной яме не может обладать любым значением энергии. Она имеет дискретный энергетический спектр, т. е. энергия частицы квантуется. Величины энергий, которыми может обладать частица, называют **уровнями энергии**. Состояние с минимальным значением энергии при $n = 1$ – основное, все остальные – возбужденные. Величина энергии увеличивается с уменьшением массы частицы и ширины потенциальной ямы, а также с увеличением порядкового номера (см. рис. 1.13).

3. Разница между двумя соседними энергетическими уровнями

$$E_{n+1} - E_n = \Delta E = \frac{h^2}{8m \cdot a^2} (2n + 1)$$

с ростом n возрастает. Относительное увеличение энергии

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2n+1}{n^2} = \frac{2}{n} + \frac{1}{n} \text{ и в пределе } n \rightarrow \infty \frac{\Delta E}{E} \rightarrow 0.$$

Это значит, что при больших значениях n энергетический спектр можно рассматривать как сплошной, т. е. результаты квантовой и классической физики сходятся. В этом состоит смысл принципа соответствия.

Электрон в атоме, электрон в кристалле твердого тела и протон в ядре атома – примеры частицы в потенциальной яме. Следует отметить, что стенки потенциальной ямы имеют другую геометрию, но в первом приближении полученные выводы применимы и к случаям при больших значениях n .

Определим энергию электрона в атоме водорода. За ширину потенциальной ямы возьмем диаметр атома $a = 10^{-10}$ м, тогда энергия электрона в атоме при $n = 1$ будет равна

$$E_1 = \frac{h^2}{8m \cdot a^2} (2n + 1) = \frac{(6,62 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-10})^2} = 6 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} \approx 30 \text{ эВ}.$$

Разность между соседними уровнями энергии

$$\Delta E = \frac{h^2}{8m \cdot a^2} (2n + 1) = 3 \cdot 30 = 90 \text{ эВ}.$$

Рассмотрим энергию электрона в кристалле. Ширина потенциальной ямы $a = 10^{-3}$ м и энергия

$$E_1 = \frac{(6,62 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-3})^2} \approx 6 \cdot 10^{-32} \text{ Дж} \approx 3 \cdot 10^{-13} \text{ эВ}.$$

Тогда разность между уровнями энергии $\Delta E = 6 \cdot 10^{-31} \text{ Дж}$ настолько мала, что говорить о дискретных уровнях не имеет смысла. Таким образом, к электрону в кристалле можно применить классическую теорию.

Для протона в ядре атома ширина потенциальной ямы $a = 10^{-15}$ м — диаметр ядра атома и энергия

$$E = \frac{(6,62 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-15})^2} \approx 3,5 \cdot 10^{-11} \text{ Дж} \approx 2 \cdot 10^8 \text{ эВ}.$$

Сравнивая энергию протона в ядре и энергию в атоме водорода, имеем $\frac{E_n}{E_e} = 1,4 \cdot 10^7$. Опытные данные дают $\frac{E_n}{E_e} = 7,6 \cdot 10^7$. Таким образом, мы получили величины одного порядка.

Если высвободить энергию хотя бы одного протона из ядра, то из одного киломоля урана выделится $2 \cdot 10^8 \cdot 6,02 \cdot 10^{26} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} = 19 \cdot 10^{15} \text{ Дж}$ энергии. Тогда один грамм урана выделяет энергии $w = \frac{19 \cdot 10^{15}}{238 \cdot 10^3} = 9 \cdot 10^{10} \text{ Дж}$, в то время как химическая энергия, связанная с перестройкой электронных оболочек (потенциальная яма шириной $a = 10^{-10}$ м), в 10^5 раз меньше, и для выделения $9 \cdot 10^{10} \text{ Дж}$ энергии необходимо сжечь 100 кг угля.

Если элементарные частицы имеют сложное строение, то и яма более узкая, примерно в 10^3 раз уже потенциальной ямы ядра, а энергия частицы в этой яме будет в 10^6 раз больше, чем энергия протона в ядре.

При ширине ямы, стремящейся к нулю $a \rightarrow 0$, энергия E частицы стремится к бесконечности. Плотность энергии определится как

$$w = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{E}{V},$$

и она может принимать сколь угодно большие значения. Если такой предел существует, то должен быть и минимальный объем пространства, т. е. пространство должно квантоваться.

Таким образом, проблема получения частиц сверхвысоких энергий – это проблема поисков квантов пространства.

Рассмотрим состояние частицы при различных n . Из рис. 1.14 (а – график $u(x)$, б – $|u(x)|^2$) видно, что вероятность пребывания электрона в разных местах отрезка неодинакова. С увеличением n число максимумов на кривой распределения вероятностей растет и при большом n настолько велико, что вероятность нахождения электрона во всех областях оказывается фактически такой же, как и для классической частицы.

Рассмотрим прохождение микрочастицы через потенциальный барьер. Пусть частица движется вдоль оси Ox в пространстве, в котором силовое поле меняется скачком (рис. 1.15).

В первой области $-\infty < x < 0$ и третьей области $d < x < \infty$ потенциальная энергия равна нулю; во второй области $0 \leq x \leq d$ потенциальная энергия постоянна и равна U . Микрочастица, находящаяся в первой области и имеющая энергию $E < U$, не может перейти в третью, так как в этом случае при переходе через вторую область частица должна иметь отрицательную кинетическую энергию $T = E - U < 0$, следовательно, мнимую скорость.

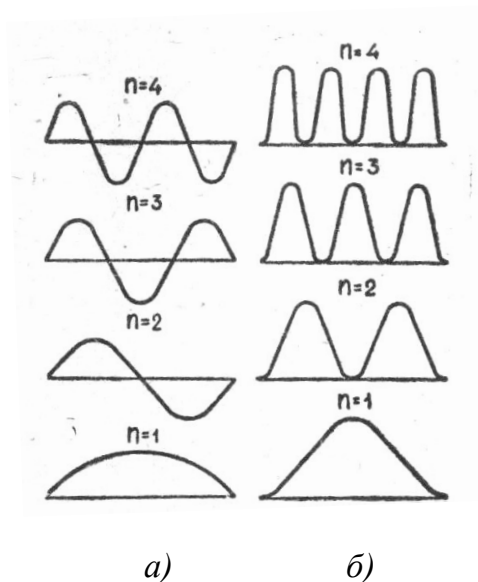


Рис. 1.14

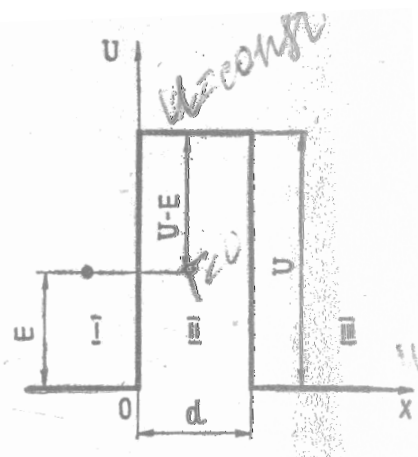


Рис. 1.15

Принцип неопределенности не позволяет рассматривать энергию микрочастицы как сумму кинетической и потенциальной энергий, так как ее координаты и импульсы могут определяться только с точностью, удовлетворяющей условиям выражений (1.5) и (1.6).

Кинетическая энергия микрочастицы определяется с неточностью ΔT , которая однозначно задана неточностью Δp , так как $T = \frac{p^2}{2m}$. Если неточность ΔT кинетической энергии будет больше или равна $U - E$, т. е. $\Delta T \geq U - E$, то микрочастица перейдет через потенциальный барьер. Действительно, подставляя неточность $\Delta p = \sqrt{2 \cdot m \cdot \Delta T}$ в соотношение неопределенностей, получим, что область, где может оказаться частица,

$$\Delta x = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot (U - E)}}.$$

При переходе $\Delta x > d$ частица может оказаться за пределами барьера, т. е. перейдет из первой области в третью. В этом случае она как бы проходит по туннелю, проложенному сквозь барьер, на уровне полной энергии E . Теория позволяет определить вероятность прохождения через барьер

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{2\pi}{h} \int_0^d \sqrt{2m(E-U)} dx}, \quad (1.16)$$

где D_0 – коэффициент порядка единицы.

Туннельный эффект – следствие уравнения Шрёдингера. Решение показывает, что ψ -функция отлична от нуля и в тех точках пространства, где $U > E$. Следовательно, с некоторой вероятностью, тем меньшей, чем больше $U - E$, частица может быть найдена и в тех областях пространства, где на языке классической физики она обладала бы отрицательной кинетической энергией.

Проникновение частицы через потенциальный барьер можно проследить на примере явления холодной эмиссии, которое заключается в том, что под влиянием электрического поля электроны начинают выходить из металла при сколь угодно низкой температуре. Рассмотрим явление холодной эмиссии с точки зрения классической физики.

В отсутствие внешнего электрического поля потенциальная энергия электрона в металле показана на рис. 1.16, а. Здесь E – энергия электрона в металле; U_0 – потенциальный барьер; W – работа выхода электрона из металла $W = U_0 - E$.

При внешнем электрическом поле $\vec{\varepsilon}$ (см. рис. 1.16, б) на электрон в точке x действуют две силы: внешнее поле с силой $\vec{F}_1 = -e\vec{\varepsilon}$ и сила $F_2 = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 x^2}$.

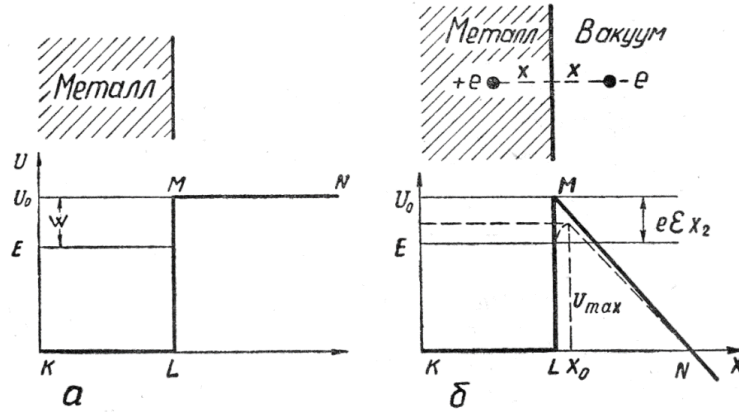


Рис. 1.16

Вылетевший электрон индуцирует на поверхности металла равный себе положительный заряд (см. рис. 1.16, б). Результирующая сила $F = e \cdot \varepsilon - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 \cdot x^2}$. Потенциальная энергия из $F = -\frac{\partial U}{\partial x}$ будет определяться как $U = -e\varepsilon x - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 \cdot x} + U_0$. На рис. 1.16, б ход потенциальной энергии показан пунктиром.

Максимум определится из условия

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{x=x_0} = -e\varepsilon + \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 \cdot x} = 0,$$

откуда

$$x_0 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{e}{\pi\varepsilon_0 \varepsilon}}.$$

Подставив x_0 в уравнение потенциальной энергии, получим

$$U_{\max} = U_0 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e^3 \varepsilon}{\pi\varepsilon_0}}.$$

Из этого выражения видно, что внешнее электрическое поле понижает потенциальный барьер на величину

$$\frac{5}{16} \cdot \sqrt{\frac{e^3 \varepsilon}{\pi\varepsilon_0}}.$$

Из металла вылетают только те электроны, которые имеют энергию больше U_{\max} . Работа выхода при внешнем поле

$$W' = U_{\max} - \varepsilon = W - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e^3 \varepsilon}{\pi \varepsilon_0}}.$$

Очевидно, что при $W' = 0$, т. е.

$$W = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e^3 \varepsilon}{\pi \varepsilon_0}},$$

должен наблюдаться максимальный ход холодной эмиссии. Отсюда находим

$$\varepsilon' = \frac{4 \pi \cdot \varepsilon_0 W^2}{e^3}.$$

Подсчитаем электрическое поле, при котором должен наблюдаться максимальный ток холодной эмиссии: для вольфрама $W = 4,9$ эВ. Подставив значение W в предыдущее выражение, получим $\varepsilon' = 10^{10}$ В/м.

Опыт показывает, что максимальный ток холодной эмиссии наступает при $\varepsilon' = 4 \cdot 10^8$ В/м. Таким образом, теория классической физики противоречит опыту.

Рассмотрим теперь явление холодной эмиссии с точки зрения квантовой механики. Электрон, обладающий энергией E , по абсолютному значению меньшей U_0 , в силу законов квантовой механики может выйти из металла туннельным переходом.

Вероятность «просачивания» частицы через потенциальный барьер дается выражением (1.16).

Потенциальная энергия электрона без учета сил изображения

$$U' = U_0 - e \cdot \varepsilon \cdot x.$$

Полагая, что $x_1 = 0$, можем написать

$$\int_0^{x_2} \sqrt{2 \cdot m \cdot (U_0 - E)} dx = -\frac{2}{3} \cdot \frac{(U_0 - e \cdot \varepsilon \cdot x_2 - E)^{3/2}}{e \cdot \varepsilon} + \frac{2}{3} \cdot \frac{(U_0 - E)^{3/2}}{e \cdot \varepsilon}.$$

Видно, что $E = U_0 - e \cdot \varepsilon \cdot x_2$, поэтому первый член равен нулю, тогда

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{8 \cdot \pi \cdot (U_0 - E)^{3/2}}{3 \cdot h \cdot e \cdot \varepsilon}},$$

или, обозначив $\alpha = -\frac{8 \cdot \pi \cdot (U_0 - E)^{3/2}}{3 \cdot h \cdot e}$, имеем $D = D_0 \cdot e^{\frac{\alpha}{\varepsilon}}$.

Именно такая зависимость тока холодной эмиссии от напряженности поля найдена экспериментально.

Линейный гармонический осциллятор. Известно, что **линейным гармоническим осциллятором** называют тело, совершающее колебания по гармоническому закону

$$x = A \cdot \sin \omega \cdot t.$$

Примером может служить двухатомная молекула.

Гармонические колебания вызываются квазиупругими силами, т. е. $F = -k \cdot x$. Потенциальная энергия осциллятора

$$U(x) = \frac{k \cdot x^2}{2}$$

имеет вид квадратичной параболы (рис. 1.17), где $k = m \cdot \omega^2 = m \cdot 4 \times \pi^2 \cdot \nu^2$. Следовательно, осциллятор находится в потенциальной яме, имеющей вид параболы.

Уравнение Шрёдингера для линейного осциллятора запишется

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} (E - 2 \cdot \pi^2 \nu^2 \cdot m \cdot x^2) \cdot u(x) = 0.$$

Функция $u(x)$ должна удовлетворять граничным условиям: при $x \rightarrow \pm \infty$ $u(x) = 0$. Характер волн де Бройля в такой яме будет иным, чем в прямоугольной. Так, например, длина волны де Бройля частицы, попавшей в яму, зависит от места нахождения частицы.

Действительно,

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}, \quad m^2 \cdot v^2 = 2 \cdot m \cdot K,$$

где K – кинетическая энергия частицы $K = E - U(x)$, откуда $m \cdot v = \sqrt{2 \cdot m \cdot (E - U)}$. Длина волны де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot (E - U)}}.$$

Поскольку потенциальная энергия $U(x)$ определяется координатой частицы, то и λ в различных местах потенциальной ямы имеет различные значения.

Введем обозначения

$$\alpha = \frac{4 \cdot \pi \cdot \nu \cdot m}{h}, \quad \beta = \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} E. \quad (1.17)$$

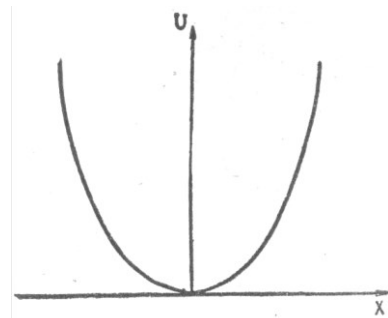


Рис. 1.17

Тогда уравнение Шрёдингера переписывается следующим образом:

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \beta \cdot u(x) - \alpha^2 \cdot x^2 \cdot u(x) = 0.$$

Волновые функции, получаемые при интегрировании уравнения Шрёдингера, которые удовлетворяют граничным условиям, называют *полиномами Чебышева – Эрмита*

$$u(x) = \sqrt{\frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/2} \cdot n! 2^n}} \cdot e^{-\alpha x^2} \cdot H_n(x), \quad (1.18)$$

где $H_n(x) = (-1)^n \cdot e^{\alpha x^2} \cdot \frac{d^n}{dx^n} \cdot e^{-\alpha x^2}.$

При этом должно выполняться условие

$$\frac{\beta}{\alpha} = 2 \cdot (v + 1),$$

где $v = 0, 1, 2, 3 \dots$

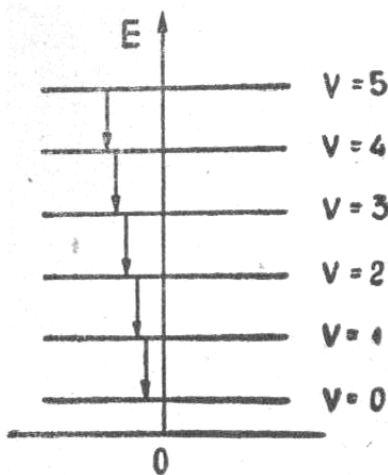


Рис. 1.18

Подставив из выражения (1.16) значения α и β в (1.17), получим

$$E = h \cdot \nu_k \cdot (v + \frac{1}{2}). \quad (1.19)$$

Из этого выражения видно, что энергия осциллятора имеет дискретный энергетический спектр (рис. 1.18), т. е. энергия осциллятора квантуется.

При $v = 0$ энергия осциллятора минимальна – это основное (стационарное) состояние. При $v \neq 0$ осциллятор возбужден. При переходе осциллятора из одного состояния в другое происходит либо поглощение, либо излучение энергии. Эта энергия испускается или поглощается целыми квантами $h\nu_k$.

Энергия осциллятора меняется на эту же величину

$$E_n - E_m = h \cdot \nu_k,$$

где E_n – конечное значение осциллятора; E_m – первоначальное значение осциллятора; ν_k – частота излучения.

В квантовой механике доказывается, что $\nu_n - \nu_m = \Delta\nu = 1$, т. е. гармонический осциллятор излучает или поглощает фотоны с энергией $h\nu_k$. Отсюда следует, что двухатомная молекула (она может рассматриваться как линейный осциллятор) обладает дискретным энергетическим колебательным спектром и излучает или поглощает фотоны одной частоты.

Особенность решения выражения (1.18) заключается в том, что энергия осциллятора даже при температуре абсолютного нуля не может быть равной нулю.

Если принять $\nu = 0$ в уравнении (1.19), получим минимальное значение энергии $E_0 = \frac{h \cdot \nu_k}{2}$.

Минимальное значение энергии осциллятора обусловлено волновыми свойствами частиц. Если бы энергия осциллятора равнялась нулю, это бы означало, что частица находится в состоянии покоя, во вполне определенном месте, например в точке x , и имеет импульс $p_x = 0$. Но для микрочастицы одновременное точное значение x и $p_x = 0$ недопустимо.

Для нулевого состояния волновая функция получается из выражения (1.18) при $n = 0$ (рис. 1.19, а)

$$u_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/2}}} \cdot e^{-\alpha x^2}.$$

На рис. 1.19, б представлена кривая плотности вероятности $|u_0(x)|^2$.

Отрезок $-A \leq x \leq A$ соответствует колебаниям микрочастицы. Из рисунка видно, что чаще всего можно найти частицу около положения равновесия ($x = 0$). Однако имеется конечная вероятность обнаружить осциллятор за пределами отрезка $2A$, т. е. при $x < -A$ и $x > A$.

Можно сравнить кривую плотности вероятности для квантового осциллятора с кривой распределения вероятности микрочастицы, совершающей гармонические колебания.

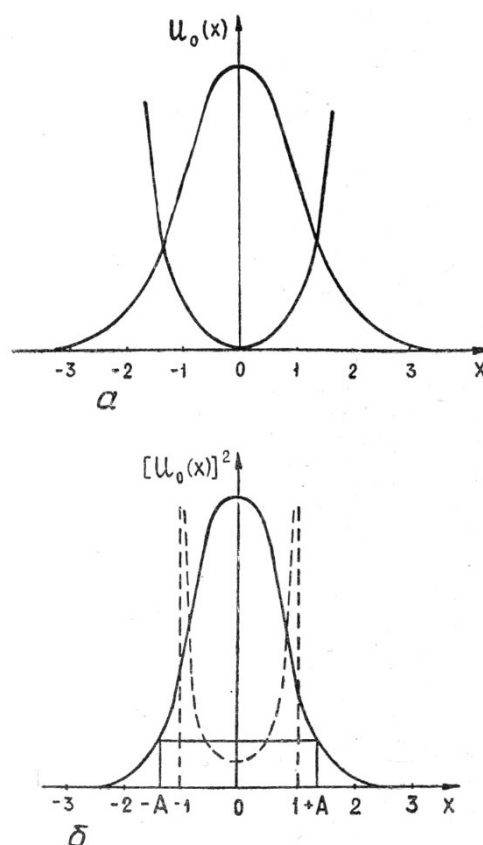


Рис. 1.19

Вероятность нахождения микрочастицы, совершающей колебательное движение, можно подсчитать так: разобьем участок, на котором движется микрочастица, на равные промежутки Δx_i и подсчитаем время Δt_i прохождения частицей каждого участка Δx_i . Отношение $\frac{\Delta t_i}{T}$ (T – период колебания) и будет определять вероятность нахождения микрочастицы на участке Δx_i . При $x = 0$ скорость движения микрочастицы максимальна; при $x = \pm A$ (A – амплитуда колебания) скорость равна нулю. Поэтому вероятность нахождения микрочастицы на разных участках будет различна. Кривая распределения вероятности для микрочастицы на рис. 1.12, б показана пунктиром.

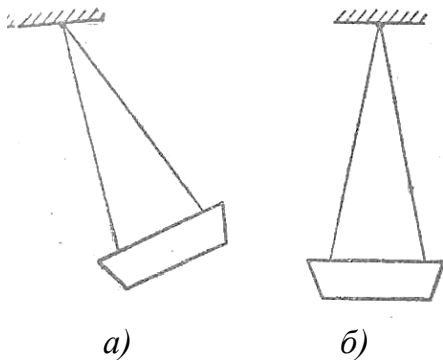


Рис. 1.20

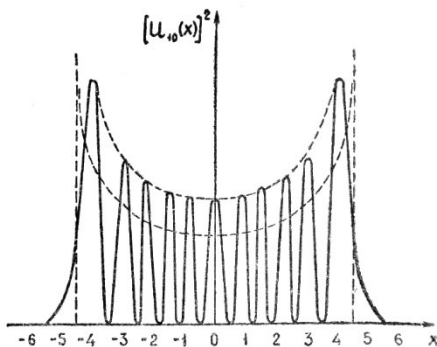


Рис. 1.21

Рассмотрим качели (рис. 1.20). Они имеют несколько положений – крайние и нижнее. Можно увидеть, что вероятность нахождения качелей в состоянии а больше, чем в состоянии б. Следует отметить, что скорость качелей в состоянии а минимальна, а в состоянии б – максимальна.

Стоячие волны де Бройля линейного осциллятора имеют $\nu + 2$ узла, т. е. $n + 2$ точки, в которых волновая функция $u(x) = 0$, а следовательно, и плотность вероятности $|u_0(x)|^2$ в этих точках равна нулю. При больших ν кривая плотности вероятности осциллятора представлена на рис. 1.21.

По мере роста x расстояние между максимумами растет.

Если провести кривую через максимумы кривой плотности вероятности, то она будет параллельна кривой распределения вероятности для микроосциллятора. Это означает, что при очень больших ν результаты, полученные из квантовой механики, совпадают с результатами, полученными из классической механики, т.

е. при предельном переходе законы квантовой механики соответствуют законам классической механики. В этом состоит принцип соответствия.

Нулевая энергия линейного осциллятора играет большую роль в объяснении сил взаимодействия между нейтральными атомами или молекулами. Эти силы получили название ван-дер-ваальсовых.

Рассмотрим следующий пример. Пусть у двух молекул заряды распределены сферически симметрично, т. е. центр тяжести положительных и отрицательных зарядов находится в одной точке. Если в таких молекулах сместить заряды, они приобретут дипольный момент $P = el$. Электрические диполи взаимодействуют друг с другом. Не исчезающие ни при каких условиях нулевые колебания с энергией $\frac{h\nu_k}{2}$ вызывают смещение зарядов внутри молекулы. Образование диполя вызывает в окружающем пространстве электрическое поле, которое индуцирует дипольный момент в соседней молекуле. Дипольные моменты непрерывно и быстро меняются; если они будут изменяться синхронно, то молекулы притянутся друг к другу.

Расчеты показывают, что если молекулы изолированы друг от друга, то их энергия

$$E = \frac{h\nu_k}{2} + \frac{h\nu_k}{2} = h\nu_k.$$

Энергия взаимодействующих молекул

$$E' = h\nu_k \cdot \left(1 - \frac{e^4}{4\pi\epsilon_0\omega^2 m r^6}\right),$$

т. е. меньше, чем изолированных, и они притягиваются друг к другу.

Величина

$$W = -\frac{h \cdot \nu_k \cdot e^4}{\pi \epsilon_0 \omega^2 m r^6} = -\frac{c}{r^6},$$

где $c = -\frac{h \cdot \nu_k \cdot e^4}{\pi \epsilon_0 \omega^2 m}$, есть энергия связи, а силы взаимодействия

$$F = -\frac{dW}{dr} = -\frac{6c}{r^7}.$$

Ротатор. Материальную частицу, совершающую вращательное движение, называют **ротатором**.

Перепишем уравнение Шрёдингера в сферических координатах, которые связаны с декартовыми соотношениями

$$x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi, y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi, z = r \cdot \cos \theta;$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \\ & + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \cdot \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} (E - U) \cdot u = 0. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Рассмотрим ротатор с неподвижной осью. В этом случае $r = \text{const}$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ и функция зависит только от φ . Потенциальная энергия $U = 0$. Тогда уравнение Шрёдингера (1.20) переписывается следующим образом:

$$\cdot \frac{\partial^2 u(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{8\pi^2 \cdot I}{h^2} E u(\varphi) = 0, \quad (1.21)$$

где $I = m \cdot r^2$ – момент инерции ротатора.

Проинтегрировав уравнение (1.21), получим

$$\cdot u(\varphi) = A \cdot e^{ik \cdot \varphi}, \quad (1.22)$$

где

$$k^2 = \frac{8\pi^2 \cdot I}{h^2} \cdot E. \quad (1.23)$$

Функция $u(\varphi)$ должна быть непрерывной, однозначной и ограниченной.

Уравнение (1.22) во всей области изменений φ (от 0 до 2π) удовлетворяет ограниченности. Оно удовлетворит условию однозначности, если

$$e^{ik \cdot \varphi} = e^{i(\varphi + 2\pi) \cdot m},$$

или $1 = e^{i2\pi \cdot m}$. Это будет только в том случае, если $k = m$ ($m = 0, 1, 2, 3 \dots$).

Из выражения (1.23) найдем

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 \cdot I} \cdot m^2.$$

Энергия ротатора имеет дискретный энергетический спектр. Подставив значение энергии осциллятора $E = \frac{I \cdot \omega^2}{2}$ в уравнение (1.23), найдем

$$I \cdot \omega = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot m,$$

но $I \cdot \omega$ – момент импульса ($L = m \cdot v \cdot r$).

Таким образом, мы пришли к важному выводу: момент импульса ротатора с неподвижной осью квантуется.

Теперь рассмотрим ротатор с неподвижной осью. В этом случае $r = const$, функция u будет зависеть только от φ и θ . Потенциальная энергия $U = 0$. Уравнение Шрёдингера запишется так:

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \cdot \frac{\partial u}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{8 \cdot \pi^2}{h^2} E \cdot u = 0. \quad (1.24)$$

Уравнение (1.24) представляет собой известное из математической физики уравнение шаровых функций. Собственные функции получаются при условии

$$\frac{8\pi^2 \cdot I}{h^2} E = j \cdot (j + 1), \quad (1.25)$$

где $j = 0, 1, 2, 3 \dots$

Найдем момент импульсов ротатора

$$L = I \cdot \omega = \frac{h}{2 \cdot \pi} \sqrt{j \cdot (j + 1)}.$$

Здесь j – квантовое число, которое получило название азимутального квантового числа. Момент импульса ротатора со свободной осью также квантуется.

Из уравнения (1.25) найдем энергию ротатора

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 \cdot I} \cdot j \cdot (j + 1).$$

Отсюда видно, что энергия ротатора со свободной осью квантуется и что расстояние между уровнями энергии ротатора растет с увеличением j . Действительно, расстояние между соседними уровнями j и $j - 1$ равно

$$\Delta E = \frac{h^2}{8\pi^2 \cdot I} \cdot j.$$

Двухатомная молекула – квантовый ротатор со свободной осью. В качестве примера рассчитаем расстояние между вращательными уровнями у молекулы NaCl. При расчете момента инерции считаем, что атомы в молекуле находятся на расстоянии $r = 10^{-10}$ м и его молекулы вращаются вокруг оси, проходящей через центр инерции, перпендикулярной к линии, соединяющей атомы. Тогда

$$I = \frac{m_{Na} \cdot m_{Cl}}{m_{Na} + m_{Cl}} \cdot r^2 = \frac{23 \cdot 35}{23 + 35} \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot (10^{-10})^2 = 2 \cdot 10^{-46} \text{ кг} \cdot \text{м}^2,$$

$$\Delta E = \frac{(6,62 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 3,14^2 \cdot 10^{-46} \cdot 4 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \cdot j = 3 \cdot 10^{-5} \cdot j \text{ эВ}.$$

Рассмотрим вращательный спектр молекул. Спектр вращательных уровней показан на рис. 1.22.

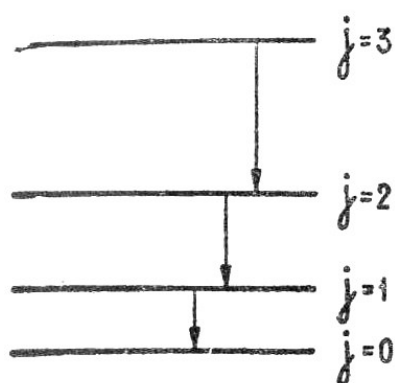


Рис. 1.22

Существуют лишь такие переходы между вращательными уровнями, при которых число j меняется на единицу.

Частота излучения вращательного спектра

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 3 \cdot 10^{-5}}{6,62 \cdot 10^{-39}} j = 7 \cdot 10^9 \cdot j \text{ Гц}.$$

Она относится к области инфракрасного излучения.

Вращательно-колебательный

спектр молекул. Мы установили, что двухатомная молекула может совершать колебания с частотой ν_k и энергия колебательного движения

$$E_k = h \cdot \nu_k \left(v + \frac{1}{2} \right),$$

где $v = 0, 1, 2, \dots$ – колебательное квантовое число.

Следовательно, полная энергия вращательного и колебательного движений

$$E = h \cdot \nu_k \left(v + \frac{1}{2} \right) + \frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot I} j \cdot (j + 1).$$

Схема энергетических уровней в произвольном масштабе показана на рис. 1.23.

При поглощении или испускании фотонов возможны переходы с любого верхнего уровня на нижние уровни, если только выполняются правила отбора, которые состоят в следующем: $j_2 - j_1 = \pm 1, 0$; $\Delta v = 1$.

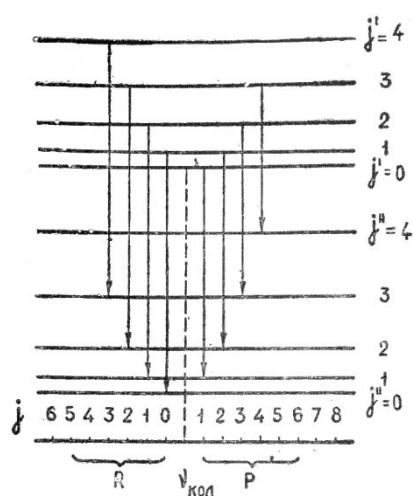


Рис. 1.23

Следует также отметить, что двухатомная молекула не излучает чистой колебательной частоты. Поэтому вращательно-колебательный спектр молекул сложный. Возможные переходы показаны на рис. 1.23 стрелками.

Тестовые вопросы и задачи

Задание 1. В чем сущность волн де Бройля?

Задание 2. Поясните физический смысл соотношений неопределенности Гейзенберга.

Задание 3. Напишите и поясните закон движения микрочастицы для стационарных состояний.

Задание 4. В чем суть проникновения частицы через потенциальный барьер?

Задание 5. Что такое гармонический осциллятор?

Задание 6. Дайте определение ротатора, приведите примеры ротатора.

Задание 7. Узкий пучок α -частиц с энергией 1 МэВ и интенсивностью $I = 3,6 \cdot 10^4$ частиц/с падает нормально на золотую фольгу толщиной 1 мкм. Сколько частиц рассеивается фольгой за $t = 10$ мин в интервале угла 60° ?

1) $1,55 \cdot 10^5$; 2) $2,8 \cdot 10^5$; 3) $3,0 \cdot 10^5$ м; 4) $4,0 \cdot 10^5$.

Задание 8. Найдите длину волны де Бройля λ для электрона, движущегося по круговой орбите атома водорода, находящегося в основном состоянии.

1) 0,33 нм; 2) 0,60 нм; 3) 0,20 нм; 4) 4,00 нм.

Задание 9. Электрон движется по окружности радиусом $r = 0,5$ см в однородном магнитном поле с индукцией $B = 8$ мТл. Определите длину волны де Бройля λ электрона.

1) 0,1 нм; 2) 2,0 нм; 3) 10,0 нм; 4) 25,0 нм.

Задание 10. Используя соотношение неопределенностей $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar$, оцените низший энергетический уровень электрона в атоме водорода. Примите линейные размеры атома $l \approx 0,1$ нм.

1) 0,1 эВ; 2) 2,0 эВ; 3) 10,0 эВ; 4) 15,0 эВ.

Тема 2. АТОМ ВОДОРОДА

Теоретический материал

Энергия и момент импульса атома водорода. Спектр атома водорода. Опыты Франка и Герца. Орбитальный магнитный момент атома водорода. Опыты Штерна и Герлаха. Спин электрона. Атом водорода в магнитном поле. Движение частицы в центрально-симметричном поле.

Энергия и момент импульса атома водорода. Известно, что атом водорода представляет собой ядро с атомным весом, равным единице, и с элементарным положительным зарядом $+e$ (протон), около которого движется один электрон.

Протон и электрон взаимодействуют в соответствии с законом Кулона. Потенциальная энергия электрона

$$U(r) = -\frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r}, \quad (2.1)$$

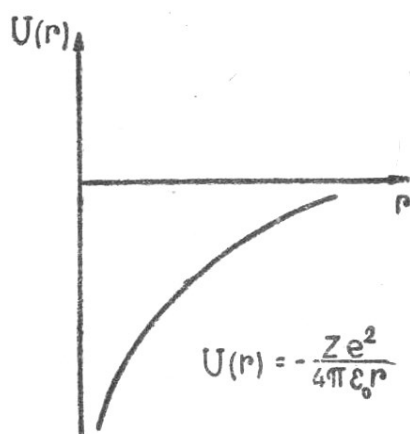


Рис. 2.1

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$; r — расстояние от ядра до электрона; $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{12}$ Ф/м — электрическая постоянная вакуума.

Атом водорода представляет собой потенциальную яму. Электрон внутри этой ямы обладает отрицательной потенциальной энергией (рис. 2.1), определяемой уравнением (2.1), стремящейся к $-\infty$ при $r \rightarrow 0$ и при $r \rightarrow \infty$ — $U(r) \rightarrow 0$.

Уравнение Шрёдингера для электрона в атоме водорода запишется

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{d^2 u}{dz^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot \left(E + \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r} \right) \cdot u = 0. \quad (2.2)$$

Поскольку уравнение (2.2) сферически симметричное, решать его удобнее в сферических координатах

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} + \\ + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot \left(E + \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r} \right) \cdot u = 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Далее задача становится чисто математической и сводится к интегрированию уравнения. Функция $u(r, \theta, \varphi)$ должна быть конечной и однозначной. Волновая функция $u(r, \theta, \varphi)$ может быть представлена произведением трех функций $R(r), \Theta(\theta), \Phi(\varphi)$, т. е.

$$u(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi). \quad (2.4)$$

Подставив уравнение (2.4) в уравнение (2.3), получим три уравнения:

$$\frac{1}{R(r)} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot r^2 \left(E + \frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0 \cdot r} \right) = \beta; \quad (2.5)$$

$$\frac{1}{\Theta(\theta) \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = -\beta; \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -m^2,$$

где β и m – постоянные величины.

Уравнение (2.6) аналогично уравнению для ротатора со свободной осью, причем

$$\beta = l \cdot (l + 1), \quad (2.7)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$

Подставив уравнение (2.7) в уравнение (2.5), получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} - \frac{2 \partial R(r)}{r \cdot \partial r} - \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m_e}{h^2} \times \\ & \times \left(E + \frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0 \cdot r} - \frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m \cdot r^2} \cdot l \cdot (l + 1) \right) \cdot R = 0. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Уравнение (2.8) можно рассматривать как уравнение Шрёдингера для электрона, потенциальная энергия которого

$$U(r) = -\frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0 \cdot r} + \frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m \cdot r^2} \cdot l \cdot (l + 1).$$

Если электрон имеет энергию $E > 0$ (рис. 2.2), то движение электрона ограничено слева потенциальным барьером. Справа никаких ограничений нет, и электрон может удаляться от ядра неограниченно. При $E < 0$ движение электрона и слева, и справа ограничено потенциальными барьерами, поэтому энергия электрона должна иметь дискретный спектр, т. е. энергия электрона в атоме квантуется.

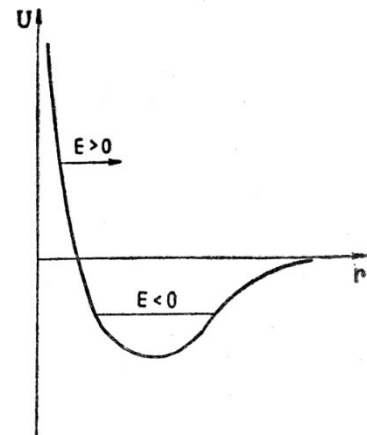


Рис. 2.2

Проинтегрировав уравнение (2.8), получим

$$E = -\frac{m_e \cdot e^4}{8 \varepsilon_0 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2},$$

где $n = 1, 2, 3 \dots$ – главное квантовое число.

Из полученного результата можно сделать следующие выводы.

1. Отрицательный знак у энергии получится потому, что потенциальная энергия на бесконечности считается равной нулю. Потенциальная энергия вдвое превышает по абсолютному значению кинетическую энергию на конечных расстояниях. Потенциальная энергия отрицательна, потому что сила притяжения электрона ядром совершает положительную работу при приближении электрона из бесконечности на конечное расстояние $A_{12} = U_2 - U_1$. Поскольку

$$U_1 = -\frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0 \cdot e}, \text{ то } A_{12} = \frac{e^2}{4 \pi \varepsilon_0 \cdot r}.$$

2. Абсолютная величина энергии означает работу, которую нужно затратить, чтобы удалить электрон в бесконечность, т. е. оторвать его от атома. Эта работа выражается в электронвольтах. Ионизационный потенциал атома выражается в вольтах и равен работе ионизации.

Работа ионизации – это разность энергий состояний: состояния, в котором электрон оторван от атома ($E = 0$), и стационарного состояния (состояния с $n = 1$)

$$A_i = E_\infty - E_1 = 0 - \left(-\frac{m_e \cdot e^4}{8 \varepsilon_0^2 \cdot h^2}\right) = \frac{m_e \cdot e^4}{8 \varepsilon_0^2 \cdot h^2}.$$

Если подставить значения в это выражение, то получим

$$A_i = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (1,60 \cdot 10^{-19})^4}{8 \cdot (8,85 \cdot 10^{-12})^2 \cdot (6,63 \cdot 10^{-34})^2} = 21,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 13,53 \text{ эВ}.$$

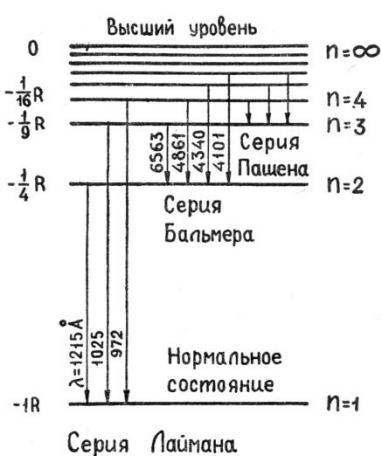


Рис. 2.3

3. Энергия атома имеет дискретный спектр, т. е. может принимать только значения, определяющиеся квантовым числом n . Энергетический спектр атома водорода показан на рис. 2.3.

Энергетические уровни изображены в виде горизонтальных линий, а сбоку дана шкала волновых чисел в см^{-1} . Самый нижний уровень ($n = 1$) соответствует основному (стационарному) состоянию атома водорода. Энергетические уровни для больших n расположены друг от друга очень близко, и поэтому

для $n \rightarrow \infty$ энергетический спектр можно считать сплошным. Электроны, у которых энергия положительна, находятся вне атома. Кинетическая энергия этих электронов может иметь любое значение.

Электрон может находиться как в непосредственной близости от ядра, так и на значительных расстояниях от него. Наибольшая вероятность пребывания электрона имеет место при

$$r_n = \frac{h^2 \cdot \varepsilon_0}{\pi \cdot m_e \cdot e^2} n^2. \quad (2.9)$$

Уравнение (2.9) совпадает с выражением, полученным в теории Бора (датский физик *Нильс Бор* (1885 – 1962)). Однако между выводами теории Бора и квантовой механики имеются принципиальные различия. В теории Бора существенная величина – радиус орбиты, по которой движется электрон вокруг ядра. В квантовой теории понятие орбиты теряет смысл. Уравнение (2.9) есть следствие волновых свойств электрона.

Из решения уравнения (2.6) получаем возможные значения момента импульса $\vec{L} = (\vec{r} \times m \cdot \vec{v})$ электрона в атоме водорода

$$L = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{l \cdot (l + 1)},$$

где $l = 0, 1, 2 \dots (n - 1)$ – азимутальное, или орбитальное, квантовое число.

В квантовой механике не все величины имеют определенное значение. Оказывается, что лишь одна из трех компонент момента импульса электрона имеет определенное значение. Если, например, компонента L_Z имеет определенное значение, то компоненты L_X и L_Y являются неопределенными, а если L_X определена, то L_Y и L_Z не определены. Принято считать основной компоненту L_Z .

Ее значение определяется магнитным квантовым числом

$$L_z = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot m, \quad (2.10)$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots + l$ (рис. 2.4).

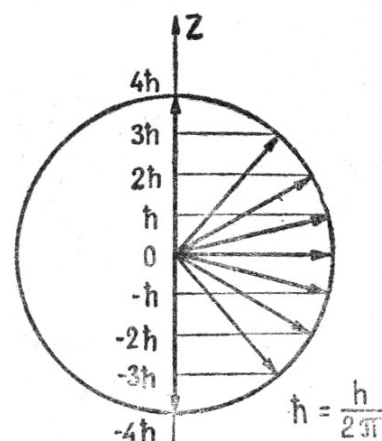


Рис. 2.4

Таким образом, интегрирование уравнения Шрёдингера дает:

а) энергию атома водорода

$$E = -\frac{m_e \cdot e^4}{8 \varepsilon_0 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2};$$

б) момент импульса электрона

$$L = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{l \cdot (l + 1)};$$

в) проекцию момента импульса на ось

$$L_z = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot m.$$

Каждая из этих физических величин определяется своим квантовым числом: n — главное квантовое число, определяющее энергию атома; l — азимутальное, или орбитальное, квантовое число, определяющее момент импульса электрона; m — магнитное квантовое число, определяющее проекцию момента импульса.

Между квантовыми числами существует последовательная связь: главное квантовое число определяет азимутальное квантовое число, т. е. $l = 0, 1, 2 \dots (n - 1)$ (может принимать n значений). Азимутальное квантовое число определяет магнитное квантовое число, т. е. $m = -l, -l + 1, -l + 2 \dots 0, 1, 2 \dots l$ (может принимать $2l + 1$ значений).

Состояние атома водорода, таким образом, описывается набором квантовых чисел (n, l, m). Каждому набору квантовых чисел соответствует функция состояния

$$u_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi).$$

Так, например, для $n = 1, l = 0, m = 0$ функция состояния имеет вид

$$u_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1}} \cdot e^{-\frac{r}{r_1}},$$

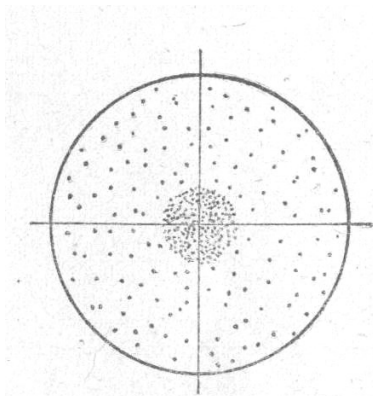


Рис. 2.5

где r_1 — радиус атома водорода в стационарном состоянии ($n = 1$). Как видно, $u_{1,0,0}$ зависит только от радиуса и обладает сферической симметрией. Электрон как бы размазан в пространстве около ядра и образует зарядовое облако, плотность которого пропорциональна $|u_{1,0,0}|^2$. Величина $|u_{1,0,0}|^2 \cdot dV$ — вероятность нахождения электрона в элементе

объема, она изменяется в пространстве двух измерений от центра к периферии (рис. 2.5).

При $n = 2, l = 0, m = 0$ получаем функцию (рис. 2.6)

$$u_{2,0,0} = \frac{1}{4 \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot r_1^{-\frac{3}{2}} \cdot \left(2 - \frac{r}{r_1}\right) \cdot e^{-\frac{2r}{r_1}}.$$

На рис. 2.6 видно, что функция $u_{2,0,0}^2$ характеризуется двумя зонами наибольшей электронной плотности: в непосредственной близости от ядра и на некотором расстоянии от него. При $n = 3$ функция имеет три области наибольшей электронной плотности, при $n = 4$ – четыре области и т. д.

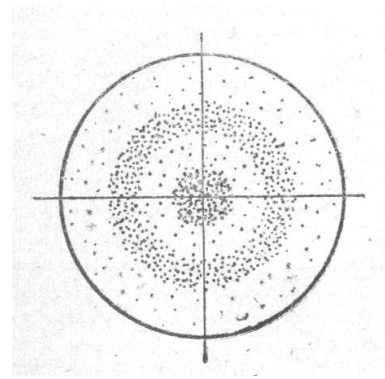


Рис. 2.6

Следует отметить, что все $u_{n,0,0}$ симметричны. В состоянии с $l = 0$ момент импульса электрона равен нулю, функции $u_{2,1,m}$ появляются при решении уравнения Шрёдингера для $n = 2, l = 1$. Квантовое число m имеет три значения: $-1; 0; 1$, с каждым из этих квантовых чисел связана волновая функция

$$u_{2,1,1}(r, \theta, \varphi) = R_{2,1} \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi;$$

$$u_{2,1,0}(r, \theta, \varphi) = R_{2,1} \cdot \cos \theta;$$

$$u_{2,1,-1}(r, \theta, \varphi) = R_{2,1} \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi.$$

Из характера радиальной функции $|R_{2,1}|^2$ (рис. 2.7) видно, что чаще всего электрон может находиться на некотором расстоянии от ядра.

Зарядовое облако изменяется в зависимости от углов (рис. 2.8): при $m = 0$ оно концентрируется вдоль оси OZ ; при $m = 1$ и $m = -1$ – вдоль осей OX и OY .

Магнитное квантовое число имеет ориентацию зарядового облака, но не форму. Во всех этих состояниях момент импульса

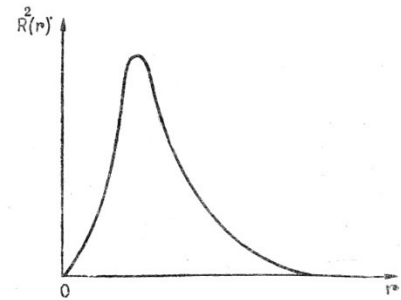


Рис. 2.7

$$L = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{l \cdot (l + 1)} = \frac{h}{2 \cdot \pi} \sqrt{2}.$$

При $n = 3, l = 2$ магнитное квантовое число принимает значения $m = -2, -1, 0, 1, 2$. Следовательно, имеется пять функций. Момент импульса

$$L = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{2 \cdot (2 + 1)} = \frac{h}{2 \cdot \pi} \sqrt{6}.$$

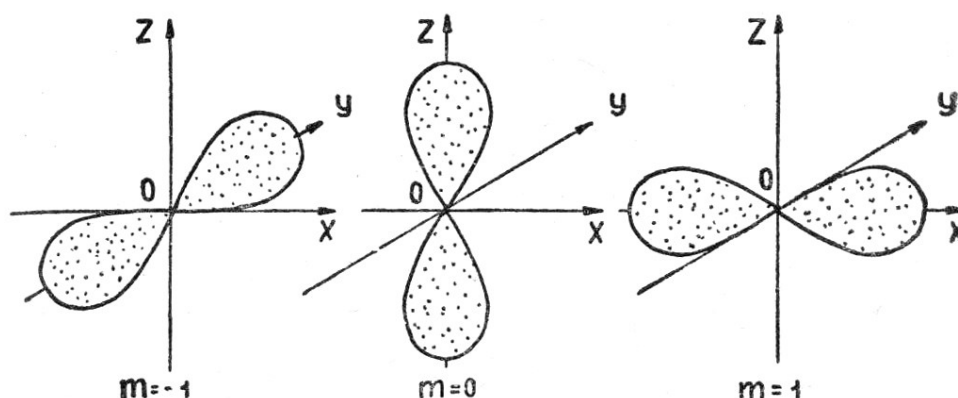


Рис. 2.8

Квантование момента импульса на ось OZ наводит на предположение, что у всех изолированных атомов водорода, не находящихся в силовых полях, например в магнитном, вектор момента импульса \vec{L} составляет с осью OZ лишь определенные углы. Но так как ось OZ выбирается в пространстве произвольно, момент атома водорода по отношению к этой оси может иметь любое направление.

Для измерения проекции момента импульса атома нужно атом привести во взаимодействие с некоторым силовым полем. В этом случае пространство, в котором находится атом, не будет изотропным. Во время опыта атом переходит из одного состояния в другое. Волновые функции до и после опыта могут быть различными. В результате опыта проекция момента импульса получается в соответствии с формулой (2.10).

При интегрировании уравнения Шрёдингера было найдено, что число собственных функций проекции момента импульса равно $2l + 1$. Можно утверждать, что $\Phi_m(\varphi)$ любого физического состояния до опыта может быть представлена в виде суперпозиции собственных решений, т. е.

$$\Phi_m(\varphi) = \sum_m c_m \cdot \Phi_m(\varphi).$$

Система, описываемая такой волновой функцией, не обладает определенной проекцией момента импульса L_z . Вектор \vec{L} может быть направлен как угодно. Но при измерении L_z всегда получим какое-то одно из $2l + 1$ значений, входящих в сумму $\Phi_m(\varphi)$.

Спектр атома водорода. В установке для изучения столкновений электронов с атомами водорода (рис. 2.9) трубка содержит водород при низком давлении. Электроны, испускаемые катодом К, ускоряются по направлению к сетке С с разностью потенциалов U . Когда электроны входят в область между С и П, они обладают кинетической энергией $\frac{m \cdot v^2}{2} = e \cdot U$. Если электроны

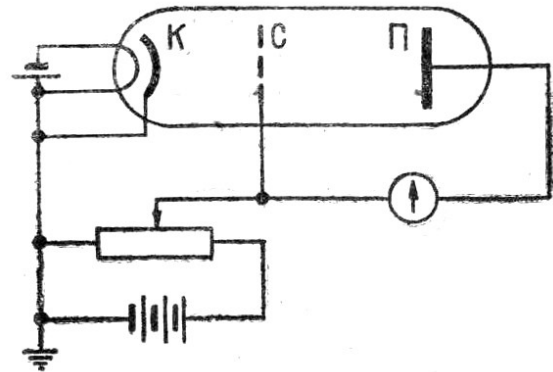


Рис. 2.9

не теряют своей энергии, то они дойдут до пластинки П и через гальванометр пойдет ток. При увеличении разности потенциалов ток будет расти до тех пор, пока энергия электрона не достигнет такой величины, которой достаточно для перевода атома водорода из стационарного в одно из возбужденных состояний.

При дальнейшем увеличении разности потенциалов будет достигнуто такое состояние, когда наступит ионизация атомов водорода и ток резко увеличится.

Численное значение напряжения равно потенциалу ионизации $\varphi_i = 13,53 \text{ В}$. В этом состоянии газа большинство атомов возбуждено. Длительное время атомы не смогут находиться в возбужденном состоянии, они спонтанно переходят в стационарное состояние. При переходе электрона из одного состояния в другое высвобождается энергия, равная $E_{n2} - E_{n1}$, и излучается квант света частотой

$$\nu = \frac{E_{n2} - E_{n1}}{h},$$

$$\text{или } \nu = \frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \varepsilon_0^2 h^3} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где n_1 и n_2 — соответствующие квантовые числа.

Для сравнения этой формулы со спектроскопическими данными удобнее написать ее в единицах волновых чисел

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c},$$

где $\bar{\nu}$ — волновое число, указывающее, сколько длин волн укладывается на единице длины

$$\bar{\nu} = \frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \varepsilon_0^2 h^3 \cdot c} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (2.11)$$

Величину $R = \frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \varepsilon_0^2 h^3 \cdot c} = 1,097373177 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ называют постоян-

ной Ридберга (*Йоганнес Ридберг* — шведский физик (1854 — 1919)). Таким образом, более кратко мы можем записать формулу (2.11) в следующем виде:

$$\bar{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Значение постоянной Ридберга, вычисленное из квантовой механики, находится в хорошем согласии со значением, полученным эмпирически. Из формул видно, что спектр атома водорода дискретный. В спектроскопических приборах каждая частота представляется отдельной тонкой линией. Поэтому такой спектр называют линейчатым и разбивают на несколько серий.

Серия Лаймана. Американский физик-экспериментатор *Теодор Лайман* (1874 — 1954) в 1906 году открыл спектральную серию в ультрафиолетовой части спектра водорода. Если у возбужденных атомов электроны переходят на первый уровень, то они будут излучать серию частот, волновые числа которых определяются формулой

$$\bar{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где $n_1 = 1$; $n_2 = 2, 3 \dots$ (см. рис. 2.3). Предельные значения волновых чисел этой серии $\bar{\nu}_{\min} = \frac{3}{4} R$; $\bar{\nu}_{\max} = R$.

Электроны вблизи иона водорода могут иметь любое значение кинетической энергии. Падая на первый энергетический уровень атома, они будут излучать. Частоты этого излучения больше, чем $\bar{\nu}_{\max}$. Следовательно, в конце серии Лаймана должен наблюдаться сплошной спектр. Серия Лаймана лежит в области ультрафиолетового спектра.

Серия Бальмера. Швейцарский физик и математик *Иоганн Бальмер* (1825 – 1898) в 1885 году обнаружил закономерность в спектральных линиях атома водорода, которая дает возможность определить длины волн всех линий водородной серии. Если у возбужденных атомов электроны переходят на второй уровень $n_1 = 2$, то будет излучаться серия частот, волновые числа которых

$$\bar{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где $n_1 = 2, n_2 = 3, 4, 5 \dots$. Предельные волновые числа $\bar{\nu}_{\min} = \frac{5}{36} R$;

$\bar{\nu}_{\max} = \frac{1}{4} R$. Как и серия Лаймана, серия Бальмера в конце имеет сплошной спектр. Следует отметить, что серия Бальмера лежит в области видимого спектра.

Серия Пашена. Немецкий физик-экспериментатор *Фридрих Пашен* (1865 – 1947) в 1908 году обнаружил первые две линии новой серии водорода в инфракрасном участке спектра

$$\bar{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где $n_1 = 3, n_2 = 4, 5 \dots$

Серия Брэкета

$$\bar{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

где $n_1 = 4, n_2 = 5, 6 \dots$

Серия Пфунда. Американский физик *Август Пфунд* (1879 – 1949) открыл спектральную серию водорода

$$\bar{\nu} = R \cdot \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

$n_1 = 5; n_2 = 6, 7 \dots$

Следует отметить, что серии Пашена, Брэкета и Пфунда лежат в области инфракрасного излучения.

Опыты Франка и Герца. Экспериментальным подтверждением квантовой теории оказались опыты Франка и Герца. *Джеймс Франк* (1882 – 1964) вместе с *Густавом Герцем* (1888 – 1975) осуществил в 1912 – 1914 годах ряд экспериментов по возбуждению и ионизации атомов паров ртути ударами электронов.

Переходы атомов с высоких энергетических уровней на более низкие могут происходить спонтанно. Для перехода атома с низкого энергетического уровня на более высокий необходим внешний источник, который передавал бы энергию атому – возбуждал атом. Наиболее удобный метод, позволяющий сообщать атомам любое точно определенное количество энергии, – метод бомбардировки атомов электронами; кинетическую энергию электронов можно сделать какой угодно, в зависимости от напряженности разгоняющего эти электроны поля. Схема опыта Франка и Герца показана на рис. 2.9. Здесь К – катод; С – сетка; П – пластинка; $U_{КС}$ – напряжение между нитью К и сеткой С, сообщаемое электрону необходимую энергию; $U_{СП}$ – разность потенциалов между сеткой С и пластинкой П, защищающая пластинку П от попадания на нее электронов, энергия которых меньше $e \cdot U_{СП}$. Обычно $U_{СП} = 0,5$ В. Гальванометр измеряет силу электрического тока в цепи «нить К – пластинка П»; по величине силы тока можно судить о числе электронов, прошедших от нити К до пластинки П. В опытах Франка и Герца измеряется сила тока как функция ускоряющего напряжения $U_{КС}$.

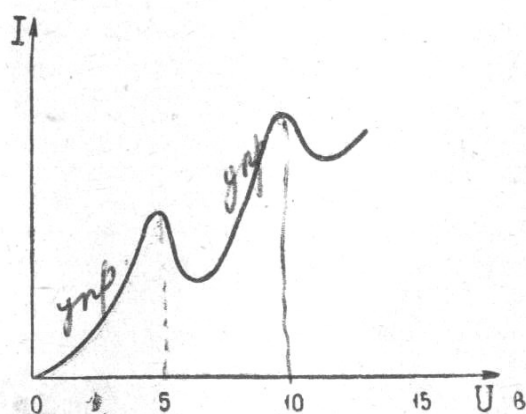


Рис. 2.10

В сосуде находятся разряженные пары ртути. Зависимость силы тока I от напряжения U (рис. 2.10) объясняется так: при движении от катода К до сетки С электрон сталкивается с атомами ртути. Существует два вида столкновений:

1) *упругое*, при котором электрон отскакивает от атома без потери энергии и лишь изменяет направление движения;

2) *неупругое*, при котором электрон отдает кинетическую энергию атому и, следовательно, теряет свою скорость – останавливается. Атом переходит в возбужденное состояние.

При увеличении напряжения $U_{КС}$ от 0 до 4,9 В происходят упругие столкновения. Электрон, петляя, в конце концов достигает пластинки П. Ток на этом участке напряжений все время растет. Когда U достигает значения 4,9 В, электрон у самой сетки претерпевает неупругий удар и всю приобретенную кинетическую энергию передает атому. Электрон останавливается и не доходит до пластинки П, ток падает почти до нуля.

При дальнейшем увеличении напряжения $U_{\text{КС}}$ электроны совершают неупругий удар, не доходя до сетки С, например в точке А, и останавливаются. Но на них действует электрическое поле, которое заставляет их перемещаться к сетке и достигать пластинки П. Ток через гальванометр снова увеличивается.

При $U_{\text{КС}} = 9,8$ В первое неупругое соударение происходит в тот момент, когда электрон проходит 4,9 В (на полпути между катодом и сеткой), второе – у самой сетки С. Электроны останавливаются и не доходят до пластинки П: защитное напряжение не пропускает медленные электроны к пластинке. Ток резко падает.

Опыт показывает, что при напряжении $U_{\text{СП}} = 9,8$ В пары ртути начинают светиться, испуская свет длиной волны $\lambda = 253,7 \cdot 10^{-9}$ м. Энергия кванта, излученная атомом ртути,

$$h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{253,7 \cdot 10^{-9}} = 7,85 \cdot 10^{-19} \text{ Дж.}$$

Напряжению 4,9 В соответствует энергия электрона $eU_{\text{КС}} = 1,6 \times 10^{-19} \cdot 4,9 = 7,84 \cdot 10^{-19}$ Дж.

Таким образом, кинетическая энергия электрона, приобретенная в электрическом поле, идет на возбуждение атома ртути. Атом ртути излучает квант света той же энергии. Поэтому потенциал $U = 4,9$ В называют **потенциалом возбуждения** или **резонансным потенциалом ртути**. Кроме потенциала возбуждения 4,9 В пары ртути имеют потенциал возбуждения 6,7 В. Атом ртути, возбужденный последним потенциалом, испускает квант света, соответствующий длине волны $\lambda = 185,0$ нм.

При напряжении $U_{\text{КС}} = 10,4$ В наблюдается ионизация атомов ртути, при свечении – появление полного спектра.

Опыты Франка и Герца показали, что атом ртути может принимать от бомбардирующего электрона не произвольное количество энергии, а вполне определенные, дискретные порции энергии. Приобретая дискретные энергии, атом переходит в возбужденные состояния: первое, второе и состояние ионизации. Следовательно, различные состояния, в которых может находиться атом, имеют дискретный характер.

Орбитальный магнитный момент атома водорода. Любое движение электрического заряда, в том числе и движение электрона в атоме, представляет собой электрический ток, который, в свою очередь, создает во внешнем пространстве магнитное поле. Рассчитаем

магнитный момент атома водорода. С позиций квантовой механики необходимо рассматривать среднюю плотность заряда в пространстве и ток вероятности. Задача оказывается объемной. В качестве первого приближения проведем расчеты магнитного момента атома с позиций классической механики.

Электрон, движущийся по плоской орбите, представляет собой элементарный ток

$$I = \frac{q}{t}.$$

За время $t = 1$ с электрон пройдет по орбите расстояние, равное v . Через каждую точку орбиты он за это время пройдет $\frac{v}{2\pi \cdot r}$ раз и пере-

несет заряд $q = \frac{e \cdot v}{2\pi \cdot r}$, откуда найдем $I = \frac{e \cdot v}{2\pi \cdot r}$.

Магнитный момент P_m кругового тока

$$\vec{P}_m = I \cdot S \cdot \vec{n},$$

где $S = \pi \cdot r^2$ – площадь, обтекаемая током. Подставляя значения силы тока и площади, найдем магнитный момент

$$\vec{P}_m = \frac{e \cdot v \cdot r}{2} \cdot \vec{n},$$

где \vec{n} – единичный вектор нормали к токовому витку.

Момент импульса электрона, движущегося по орбите,

$$\vec{L} = \vec{r} \times m_e \cdot \vec{v},$$

где m_e – масса электрона. Свяжем магнитный момент и момент импульса электрона и получим $\vec{P}_m = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \vec{L}$.

Если учесть, что заряд электрона равен $-e$ и e – абсолютное значение заряда, то получим

$$\vec{P}_m = -\frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \vec{L}.$$

Магнитный момент электрона, движущегося по плоской орбите, направлен в сторону, противоположную моменту импульса, и связан с ним множителем $\frac{e}{2 \cdot m_e}$. Этот множитель называют **гиромангнитным отношением**.

Переходя к квантовой механике, отметим, что

$$L = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{l \cdot (l + 1)},$$

откуда модуль магнитного момента электрона

$$P_m = \frac{e \cdot h}{4 \cdot \pi \cdot m_e} \cdot \sqrt{l \cdot (l + 1)}.$$

Это выражение определяет возможные значения магнитного момента электрона, который получил название **орбитального магнитного момента**. Орбитальный магнитный момент атома водорода P_m квантуется. Проекция орбитального магнитного момента электрона на какую-либо ось, например на ось OZ , определится проекцией момента импульса

$$P_{mZ} = \frac{e \cdot h}{4 \cdot \pi \cdot m_e} \cdot m = \mu_B \cdot m.$$

Магнитный момент P_m и его проекция на ось OZ выражаются в единицах μ_B . Единица измерения магнитных моментов электронов – *магнетон Бора*

$$\mu_B = \frac{e \cdot h}{4 \cdot \pi \cdot m_e}.$$

В единицах СИ $\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ А} \cdot \text{м}^2$.

Из изложенного видно, что в состояниях с $l = 0$ орбитальный момент атома водорода равен нулю.

Опыты Штерна и Герлаха. Спин электрона. В 1922 году немецкие физики *Отто Штерн* (1888 – 1969) и *Вальтер Герлах* (1889 – 1979) провели эксперименты, доказывающие наличие магнитного момента у атома – пространственное квантование. Опыт заключался в измерении отклонения атомов в неоднородном магнитном поле (рис. 2.11). Если в неоднородном магнитном поле вдоль оси OX движется магнитный диполь с моментом \vec{P}_m , то на него действует сила

$$F = P_{mZ} \frac{dB}{dz},$$

где $\frac{dB}{dz}$ – градиент индукции в направлении оси OZ . В трубку, где был создан вакуум порядка

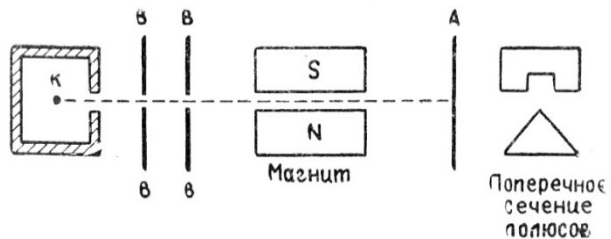


Рис. 2.11

10^{-5} мм рт. ст., помещали источник пучка атомов. Из этих атомов диафрагма вырезала узкий пучок, проходящий через сильное неоднородное магнитное поле, направленное перпендикулярно пучку. Неоднородность поля достигалась применением сильного электромагнита с полюсными наконечниками в виде ножа, входящего в паз. Приёмником атомов служила пластинка A .

Рассмотрим прохождение атомарного водорода через установку. Если атом водорода находится в состоянии $n = 1, l = 0$, то магнитный момент водорода равен нулю и пучок атомов водорода не должен расщепляться.

Если атом водорода находится в состоянии $l = 1$, пучок атомов водорода должен расщепляться на три. В этом случае будет $2l + 1$, т. е. три проекции магнитного момента атома водорода на направление магнитного поля.

Однако опыты показали, что пучок атомарного водорода, атомы которого находились в состоянии $n = 1, l = 0$, расщепляется на две компоненты. Таким образом, когда орбитальный момент атома равен нулю, у атомарного водорода имеется магнитный момент.

По известной величине $\frac{dB}{dz}$ и силе F , найденной из отклонения пучка атомов, определим магнитный момент P_{mZ} , который оказался равным магнетону Бора $\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-23}$ Ам². Расщепление пучка атомов магнитным полем объясняется тем, что магнитный момент атома в целом обусловлен собственным магнитным моментом электрона, который, в свою очередь, связан с собственным механическим моментом (моментом импульса) электрона – **спином** (от англ. *to spin* – «вращаться»). Спин электрона следует рассматривать как одно из свойств, например как свойство электрона обладать отрицательным элементарным зарядом. Спин – свойство не только электрона, но и всех других элементарных частиц.

Согласно общим выводам квантовой механики, спин должен квантоваться по закону

$$L_s = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{s \cdot (s + 1)},$$

где s – спиновое квантовое число.

Проекция L_{sz} на направление OZ должна квантоваться по закону

$$L_{sz} = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot s.$$

Число возможных ориентаций L_s принимает $2s + 1$ различных значений. Из опытов Штерна и Герлаха следует, что ориентаций спина в пространстве две, следовательно, $2s + 1 = 2$ и $s = \frac{1}{2}$, а магнитное спиновое квантовое число (или просто спиновое квантовое число) имеет два значения: $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$ (как и орбитальные числа l и $m: 0, \pm 1, \pm 2 \dots \pm l$).

Спиновое квантовое число, в отличие от введенных ранее трех квантовых чисел (главного n , орбитального l и магнитного m), не целое.

Определим численные значения спина

$$L_s = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} + 1\right)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi}$$

и проекции спина на направление внешнего поля

$$L_{sz} = \pm \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi}.$$

Как следует из опытов Штерна и Герлаха, проекция спинного магнитного момента P_{msz} равна магнетону Бора. Отношение P_{msz} к L_{sz} дает спиновое гиромагнитное число

$$g_s = \frac{P_{msz}}{L_{sz}} = \frac{e}{m},$$

которое оказывается вдвое больше орбитального гиромагнитного отношения.

Из отношений проекций векторов, направленных по одной прямой в противоположные стороны, можно составить отношение численных значений векторов $\frac{P_{msz}}{L_{sz}} = g_s$ и связь между ними $\vec{P}_{ms} = g_s \cdot \vec{L}_s$.

$$\text{Найдем модуль } |\vec{P}_{ms}|$$

$$|\vec{P}_{ms}| = \frac{e \cdot h}{2 \cdot \pi \cdot m_e} \cdot \sqrt{s \cdot (s + 1)} = \sqrt{3} \cdot \mu_B.$$

Полный момент импульса электрона в атоме водорода равен векторной сумме орбитального момента и спина электрона

$$\vec{j} = \vec{L} + \vec{L}_s.$$

Согласно законам квантовой механики абсолютное значение полного момента импульса

$$j = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{j \cdot (j + 1)},$$

где j – квантовое число полного момента импульса.

Квантовое число j может быть только кратно нечетному числу $\frac{1}{2}$, так как s всегда равно либо $+\frac{1}{2}$, либо $-\frac{1}{2}$.

j для данного l может принимать два значения: $j_1 = l + \frac{1}{2}$ и $j_2 = l - \frac{1}{2}$.

Таким образом, с открытием спина состояние электрона в атоме водорода определяется набором четырех квантовых чисел: n , l , m , s , и с каждым квантовым числом связана определенная физическая величина:

n – энергия;

l – момент импульса;

m – проекция момента импульса;

s – собственный момент импульса.

Состояние электрона можно определить также набором n , l , m , j , где j – полный момент импульса, определяемый как сумма орбитального и собственного моментов импульса.

В спектроскопии состояние с различными значениями l принято обозначать буквами, а именно:

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$$

$$s, p, d, f, g, h.$$

Если электрон в атоме водорода обладает энергией, определяемой квантовым числом n , то он может находиться в одном из $2n^2$ состояний. Действительно, число состояний с орбитальным квантовым числом l равно числу проекций момента импульса, т. е. $2l + 1$. В каждом из этих состояний спин электрона принимает два значения. Следовательно, с учетом спина число состояний будет равно $2(2l + 1)$.

Число l принимает n значений от 0 до $n - 1$. Всего состояний, таким образом,

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2 \cdot (2l + 1) = 2 \cdot n^2,$$

т. е. $2n^2$ имеют одинаковую энергию.

Если энергетическому уровню соответствует больше чем одно состояние, говорят, что он *вырожден*. Число состояний с одинаковой энергией называют **кратностью вырождения**.

Атом водорода в магнитном поле. Поместим атом водорода в магнитное поле. Если атом возбужден, то может быть $l \neq 0$. Это значит, что атом водорода обладает магнитным моментом P_m . Взаимодействие

Рассмотрим следующие примеры. Известно, что **водородоподобные атомы** – это такие атомы, у которых в поле ядра с зарядом Ze находится один электрон,

$$E_n = -\frac{m_e \cdot Z^2 \cdot e^4}{8 \cdot \varepsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2};$$

$$r_n = -\frac{\varepsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot Z \cdot e^2 \cdot m_e} \cdot n^2.$$

Мезоатомы – это атомы, полученные при замене электрона в атоме водорода (или любом другом атоме) отрицательным мезоном.

Известно, что отрицательным мезоном μ называют частицу с массой в 207 раз больше массы электрона ($m = 207 m_e$) и зарядом, равным заряду электрона,

$$E_n = -\frac{207 \cdot m_e \cdot e^4}{8 \cdot \varepsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2};$$

$$r_n = -\frac{\varepsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot e^2 \cdot 207 \cdot m_e} \cdot n^2.$$

Мезоатомы получаются при пропускании пучка отрицательных μ -мезонов через водород.

Отрицательный μ -мезон, попадая в кулоновское поле протона, захватывается последним, образуя систему, подобную атому водорода. Поскольку радиус мезоатома в 207 раз меньше атома водорода, захваченный мезон экранирует поле ядра и электрон покидает атом.

Спектр излучения мезоатома водорода хорошо изучен и полностью согласуется с формулой

$$\nu = \frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{h} = \frac{207 \cdot m_e \cdot e^4}{8 \cdot \varepsilon_0^2 \cdot h^3} \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Мезоатомы могут образовываться и с другими атомами. Поскольку радиус движения мезона в 207 раз меньше, он всегда располагается к ядру ближе, чем остальные электроны. Поэтому на его движение электроны не влияют.

Эксперименты показали, что мезоатомы образуют только атомы легких элементов, для которых Z не превышает десяти. Для тяжелых элементов радиус становится настолько малым, что мезон захватывается ядром, где поле описывается потенциалом

$$U(r) = -\frac{e}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r}.$$

Отклонение частоты излучения используют для определения радиуса тяжелых ядер.

Тестовые вопросы и задачи

Задание 1. Как определяют энергию и момент импульса атома водорода?

Задание 2. Какие энергетические серии присутствуют в атоме водорода?

Задание 3. В чем физический смысл опытов Франка и Герца?

Задание 4. Как положения квантовой механики подтвердили опыты Штерна и Герлаха?

Задание 5. Как определяется спин электрона? Дайте пояснения квантовым числам.

Задание 6. Длины волн головной линии серии Лаймана и границы серии Бальмера в спектре атомарного водорода равны соответственно 1215 и 3650 Å. Определите по этим данным энергию ионизации невозбужденного атома водорода.

1) 9,1 эВ; 2) 11,0 эВ; 3) 12,1 эВ; 4) 13,5 эВ.

Задание 7. Атом водорода поглощает фотон, вследствие чего электрон, находившийся на второй боровской орбите, вылетает из атома со скоростью $6 \cdot 10^5$ м/с. Определите частоту фотона.

1) $1,06 \cdot 10^9$ МГц; 2) $1,06 \cdot 10^9$ МГц; 3) $1,06 \cdot 10^9$ МГц;
4) $1,06 \cdot 10^9$ МГц.

Задание 8. Вычислите энергию связи электрона в возбужденном состоянии атома водорода, если известно, что при переходе в основное состояние атом излучил фотон с длиной волны 972,5 Å.

1) 0,85 эВ; 2) 5,00 эВ; 3) 5,10 эВ; 4) 5,50 эВ.

Задание 9. Вычислите дебройлевскую длину волны частицы массой 1 г, летящей со второй космической скоростью (11,2 км/с).

1) $6 \cdot 10^{-25}$ Å; 2) $4 \cdot 10^{-25}$ Å; 3) $8 \cdot 10^{-25}$ Å; 4) $9 \cdot 10^{-25}$ Å.

Задание 10. Исходя из принципа неопределенностей Гейзенберга, оцените радиус первой боровской орбиты атома водорода.

1) $0,5 \cdot 10^{-10}$ м; 2) $1,5 \cdot 10^{-10}$ м; 3) $2,5 \cdot 10^{-10}$ м; 4) $5,5 \cdot 10^{-10}$ м.

Тема 3. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

Теоретический материал

Строение электронных оболочек атома. Орбитальный магнитный момент атома. Спиновый магнитный момент атома. Полный магнитный момент атома. Магнитомеханические явления. Правила отбора при излучении атома. Атом в магнитном поле.

Строение электронных оболочек атома. Задача о движении одной частицы в центрально-симметричном поле решается до конца. Состояние электрона в атоме определяется четырьмя квантовыми числами: n, m, l, s либо n, l, m, j .

В многоэлектронных атомах потенциальная энергия электрона может быть определена как

$$U_i(r) = -\frac{z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r} + \sum_k^{z-1} \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r_{ik}},$$

где ze – заряд ядра; r – расстояние электрона до ядра; r_{ik} – расстояние между i -м и k -м электронами; $\sum_k^{z-1} \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r_{ik}}$ – потенциальная энергия

взаимодействия между этим электроном и остальными электронами.

Точного решения уравнения Шрёдингера для многоэлектронного атома нет, но есть приближенные. В частности, движение электрона рассматривается как движение в водородоподобном атоме, состоящем из ядра с зарядом $+ze$ и отрицательной сферически симметричной оболочки, образованной $(z - 1)$ электронами. Решение уравнения Шрёдингера для этого случая имеет много общего с решением его для атома водорода. Состояние электрона в многоэлектронном атоме определяется теми же четырьмя квантовыми числами: n, m, l, s .

Решение уравнения Шрёдингера для электронов, находящихся в кулоновских электрических полях, приводит к тому, что число состояний с главным квантовым числом n равно $2n^2$. Все эти состояния характеризуются одинаковой энергией. Ранее мы отметили, что такие состояния называют вырожденными. В магнитном поле электроны приобретают дополнительную энергию, зависящую от ориентации магнитного момента электрона. Каждое состояние, таким образом, характеризуется определенным значением энергии, или, как говорят, в магнитном поле вырождение снимается.

В многоэлектронном атоме каждый электрон находится в магнитном поле соседних электронов, поэтому энергия электрона зависит не только от n , но и от l .

Решим следующую задачу: какой набор квантовых чисел характеризует состояние электрона в атоме? Квантовая механика не дает общего принципа решения этой задачи. Можно утверждать, что в атоме с одинаковым набором квантовых чисел двух электронов не может быть, так как они окажутся неразличимыми. Неразличимых частиц не может существовать, так как они будут аппроксимироваться неразличимыми (т. е. существенно когерентными) волнами де Бройля в другом месте. В этом состоит принцип Паули (физик-теоретик *Вольфганг Паули* (1900 – 1958)): в атоме не может быть двух электронов, находящихся в одном и том же состоянии.

Электроны в атоме в соответствии с принципом Паули образуют электронные оболочки: электроны с главным квантовым числом $n = 1$ образуют K -оболочку; с $n = 2$ образуют L -оболочку; с $n = 3$ образуют M -оболочку; с $n = 4$ образуют N -оболочку и т. д. Другими словами, можно оболочки (электронные слои) распределить следующим образом:

I	Электронный слой	K
II	Электронный слой	L
III	Электронный слой	M
IV	Электронный слой	N
V	Электронный слой	O
VI	Электронный слой	P
VII	Электронный слой	Q

Каждая электронная оболочка делится на подоболочки, которые определяются орбитальным квантовым числом l . Так, электроны с $l = 0$ образуют s -подоболочку; с $l = 1$ образуют p -подоболочку и т. д.

В каждой подоболочке может находиться $2(2l + 1)$ электронов, так как магнитное квантовое число может иметь $2l + 1$ значений, а спинное число – два значения. В электронной оболочке может находиться $\sum 2 \cdot (2 \cdot l + 1) = 2 \cdot n^2$ электронов. Сведем это в таблицу.

Количество электронов в оболочке и подоболочке

n	Подоболочка					Количество электронов в оболочке
	s	p	d	f	g	
1	2	0	0	0	0	2
2	2	6	0	0	0	8
3	2	6	10	0	0	18
4	2	6	10	14	0	32
5	2	6	10	14	18	50

Состояние электрона в атоме обозначается буквами, соответствующими орбитальному квантовому числу l . Число перед буквой показывает, к какой электронной оболочке электрон относится. Число справа, вверху буквы, показывает число электронов в подоболочке. Так, например, $2p^4$ означает, что четыре электрона находятся в состоянии, которое описано главным квантовым числом $n = 2$ и орбитальным $l = 1$.

Распределение электронов в атоме по состояниям подчиняется принципу Паули, и в стационарном состоянии атом имеет минимальную энергию.

По мере увеличения положительного заряда ядра при переходе от одного химического элемента к другому увеличивается число электронов, образующих оболочку атома. Каждый вновь присоединяемый электрон стремится занять состояние с наименьшей энергией. Однако если это состояние уже занято, то, согласно принципу Паули, оно недоступно для других электронов; им приходится размещаться в других состояниях. Поэтому при построении атомов периодической системы элементов Менделеева сначала заполняется K -оболочка, затем L -оболочка и т. д. В подоболочках сначала заполняется s -подоболочка, затем подбо­ло­чки p , d , f и т. д.

Следует отметить, что в многоэлектронных атомах (с $z = 19$) наблюдаются отклонения от указанной схемы, поскольку она не учитывает в сложных атомах взаимодействие электронов между собой. Причина отступления от «правильного» порядка заполнения электронных оболочек – в экранировке ядра атома внутренними электронами.

Для s -электронов экранировка оказывается наименьшей. Волновые функции s -электронов имеют максимум в центре атома, поэтому s -электроны в среднем находятся в более сильном поле, чем

p -электроны с меньшим значением n ; s -электроны располагаются значительно глубже, чем уровни p, d, f одной или двух предыдущих электронных оболочек.

С увеличением числа электронов в атоме влияние экранировки сказывается на порядке заполнения уровней все сильнее, что можно проследить на электронных конфигурациях (табл. 6 приложения).

Из-за экранировки состояние $4s$ оказывается энергетически более низким, чем $3d$, и заполняется оно у калия раньше, чем $3d$.

Заполнение валентных оболочек происходит следующим образом:

$1s$	$2s2p$	$(3s\ 3p)$	$(4s\ 3d)4p$	$(5s\ 4d)5p$	$(6s\ 4f\ 5d)6p$
2	2 6	2 6	2 10 6	2 10 6	2 14 10 6
2	8	8	18	18	32

Здесь в круглые скобки заключены близко расположенные электронные уровни. Фигурные скобки на примере ниже означают оболочки, соответствующие периодам периодической системы элементов Менделеева.

В качестве примера рассмотрим атом кальция Са с зарядом ядра $z = 20$ и числом электронов 20. В каких состояниях они находятся?

$$n = 1, \quad l = 0, m = 0 \quad s = \frac{1}{2}, \quad s = -\frac{1}{2} \quad 1s^2;$$

$$n = 2 \left\{ \begin{array}{l} l = 0, \quad m = 0, \quad s = \frac{1}{2}, \quad s = -\frac{1}{2} \quad 2s^2; \\ l = 1, \quad m = 1, 0, -1, s = \frac{1}{2}, \quad s = -\frac{1}{2} \quad 2p^6; \end{array} \right.$$

$$n = 3 \left\{ \begin{array}{l} l = 0, \quad m = 0, \quad s = \frac{1}{2}, \quad s = -\frac{1}{2} \quad 3s^2; \\ l = 1, \quad m = 1, 0, -1, \quad s = \frac{1}{2}, \quad s = -\frac{1}{2} \quad 3p^6; \\ l = 2, \quad m = 2, 1, 0, -1, -2, s = \frac{1}{2}, \quad s = -\frac{1}{2}. \end{array} \right.$$

В наружной подоболочке не бывает больше восьми электронов, поэтому $3d$ -состояния ($l = 2$) в кальции не реализуются.

Создается новая оболочка $n = 4$, $l = 0$, $m = 0$, $s = \frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$.

Состояния электронов в атоме кальция можно представить в виде $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$.

Видно, что третья оболочка недостроена, так как на ней может быть $2 \cdot 3^2 = 18$ электронов, а в кальции только 8. Достройка d -подоболочки идет у Si, Ti, V, Cr, Ni, Fe, Co. Все элементы, кроме Cr, двухвалентны. В атоме хрома d -подоболочка «захватывает» один из электронов $4s$ -подоболочки, обнаруживая тем самым, что s - и d -уровни расположены очень близко друг к другу. Другое подтверждение этому наблюдается у меди, где d -подоболочка заполняется за счет s -подоболочки.

Атом железа Fe может быть двухвалентным и трехвалентным. Электрон может быть в $4s$ - и $3d$ -состоянии.

Орбитальный магнитный момент атома. В сложных много-электронных атомах полный орбитальный механический момент (момент импульса) представляет собой сумму орбитальных механических моментов отдельных электронов и обозначается буквой M .

В квантовой механике векторный характер моментов сохраняется, но при обсуждении правил сложения следует помнить, что как сам момент, так и его проекция квантуются по известным правилам

$$M = \frac{h}{2\pi} \sqrt{L(L+1)}; \quad M_z = \frac{h}{2\pi} \cdot m_z.$$

Здесь L – квантовое число – может принимать все целочисленные значения, заключенные между максимальным и минимальным значениями алгебраической суммы $l_1 + l_2 + l_3 + \dots = \sum l_i$ орбитальных квантовых чисел отдельных электронов

$$L = 0, 1, 2, \dots; \quad m_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm L.$$

Например, атом имеет два электрона с орбитальными механическими моментами $l_1 = 2$ и $l_2 = 1$. Максимальное значение суммы $L = 3$, минимальное $L = 1$, между ними может быть только одно целочисленное, равное 2; т. е. в этом случае $L = 3, 2, 1$. На рис. 3.1 показаны ориентации механических моментов электронов и атома.

Магнитный момент, обусловленный орбитальным механическим моментом,

$$P_m = \frac{e \cdot h}{4\pi \cdot m_e} \sqrt{L(L+1)} = \mu_B \cdot \sqrt{L(L+1)},$$

где μ_B – магнетон Бора.

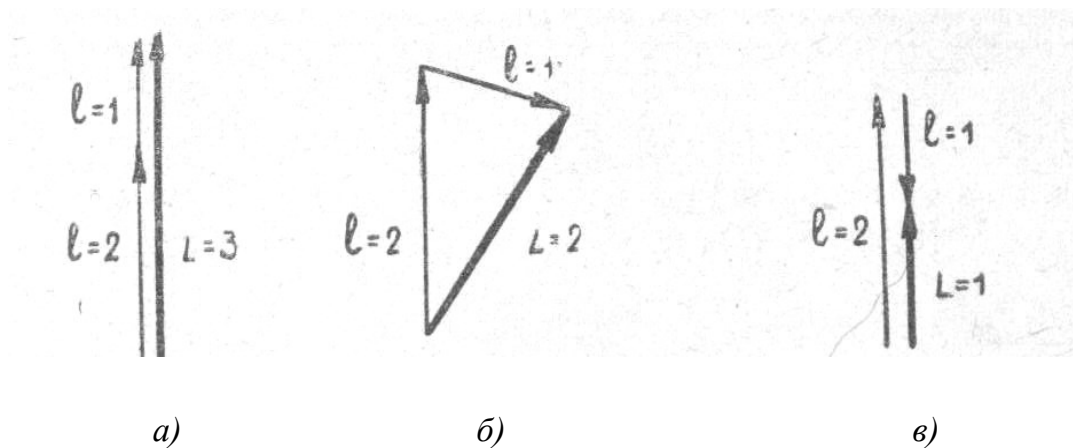


Рис. 3.1

Поскольку заряд электрона отрицателен, то в соответствии с правилом правого винта магнитный момент и механический момент оказываются с противоположными знаками.

Спиновый магнитный момент атома. В многоэлектронных атомах полный спиновый механический момент

$$M_s = \sum L_{s_i},$$

где s – спин i -го электрона атома.

Численное значение полного спина

$$M_s = \frac{h}{2\pi} \sqrt{s(s+1)},$$

где s может принимать значения, отличающиеся друг от друга на единицу и заключенные между максимальными и минимальными значениями алгебраической суммы $\sum s_i$ спиновых квантовых чисел отдельных электронов. Следовательно, s для нечетного числа электронов должно быть нечетным и кратным $\frac{1}{2}$, а для четного числа электронов должно быть равно целому числу. Это означает, что векторы, изображающие спин, должны быть либо параллельны, либо антипараллельны.

В качестве примера подсчитаем возможные значения спина для трех электронов.

$$\text{Максимальные значения } s_{\max} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}.$$

Минимальные значения $s_{\min} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$.

В этом случае s принимает только два значения (рис. 3.2, а, б). Теперь подсчитаем возможные значения спина для четырех электронов.

Максимальные значения суммы $s_{\max} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 2$.

Минимальные значения $s_{\min} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$. Между ними может быть только одно значение $s = 1$. Таким образом, сумма s принимает три значения: $s = 2, 1, 0$ (рис. 3.2, в, г, д).

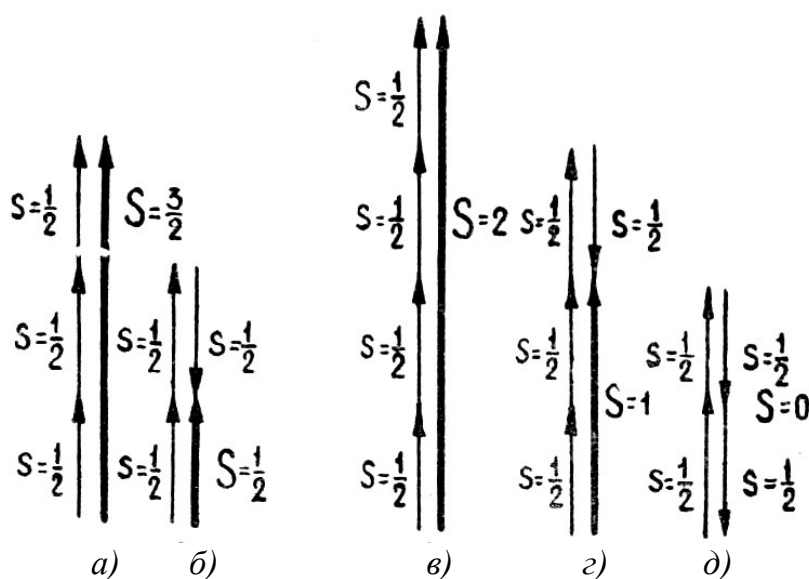


Рис. 3.2

Магнитный момент, обусловленный спином, определяется уравнением $P_{ms} = 2 \cdot \mu_B \cdot \sqrt{s(s+1)}$. Ориентация спиновых магнитных моментов показана векторами.

Полный магнитный момент атома. В атомах, в которых изменение состояния определяется переходами двух или более электронов, полный момент импульса этих электронов j зависит от взаимодействия между орбитальным моментом и спином. Опыт показал, что наиболее встречающийся тип взаимодействия – взаимодействие $L - S$. Для этого типа связи $\vec{J} = \vec{M} + \vec{M}_s$.

Численное значение определяется внутренним квантовым числом

$$J = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{j(j+1)},$$

которое может принимать значения

$$\begin{aligned} j &= L + S, & L + S - 1, \dots, L - S, & \text{если } L > S; \\ j &= S + L, & S + L - 1, \dots, S - L, & \text{если } S > L, \end{aligned}$$

j должно быть целым, если S – целое, и полуцелым, если S – полуцелое.

Проекция полного механического момента атома на какое-нибудь направление (например, направление внешнего магнитного поля) квантуется по правилу

$$j_B = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot m_j,$$

где m_j – магнитное квантовое число атома, $m_j = 0, \pm j, \pm(j-1), \pm(j-2) \dots$ (всего $2j+1$ значений).

Рассмотрим следующий пример. Орбитальный момент атома $L = 2$ и спиновый момент $S = 3/2$.

Полный механический момент имеет значения

$$\begin{aligned} j_1 &= 2 + \frac{3}{2} = \frac{7}{2}, & j_2 &= 2 + \frac{3}{2} - 1 = \frac{5}{2}, \\ j_3 &= 2 + \frac{3}{2} - 2 = \frac{3}{2}, & j_4 &= 2 + \frac{3}{2} - 3 = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

На рис. 3.3 показаны ориентации механических моментов.

Рассмотрим следующий пример. Атом имеет орбитальный момент $L = 2$ и спиновый момент $S = 1$. Тогда полный механический момент принимает значения $j_1 = 2 + 1 = 3$; $j_2 = 2 + 1 - 1 = 2$; $j_3 = 2 + 1 - 2 = 1$ (рис. 3.4).

Полный магнитный момент атома

$$P_m = \mu_B \cdot L + 2 \cdot \mu_B \cdot S,$$

откуда следует, что полный магнитный момент атома не антипараллелен полному механическому моменту.

На рис. 3.3 показаны соотношения между магнитными моментами и механическими моментами. В выбранном масштабе длина P_m в два раза больше M . Следовательно, длина P_{ms} должна быть в четыре раза больше, чем M_s .

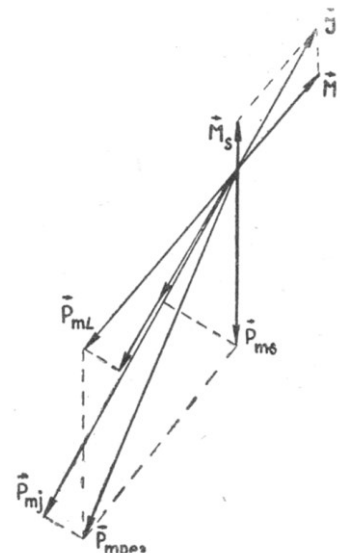


Рис. 3.3

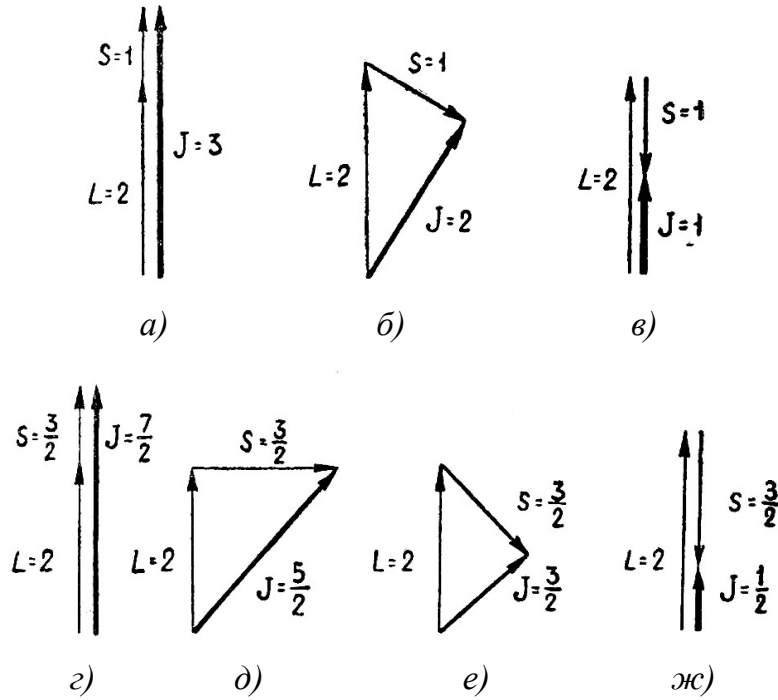


Рис. 3.4

В центральном электрическом поле вектор \vec{j} сохраняет величину и направление, а векторы \vec{M} и \vec{M}_S не сохраняют из-за магнитного взаимодействия. В то же время абсолютная величина \vec{M}_S не меняется. Сохраняется и абсолютная величина вектора \vec{M} . Эта картина соответствует вращению векторов \vec{M} и \vec{M}_S вокруг суммарного вектора \vec{M} . Вместе с \vec{M} и \vec{M}_S вокруг \vec{j} вращаются \vec{P}_{mL} , \vec{P}_{mS} , \vec{P}_m . При таком движении у вектора \vec{P}_{mL} сохраняется только проекция P_{mj} на направление вектора \vec{j} . Перпендикулярные составляющие \vec{M} и \vec{M}_S , усредненные за период движения, будут равны нулю. Поэтому эффективный магнитный момент

$$P_{mj} = P_{mL} \cdot \cos(\vec{M} \cdot \vec{j}) + P_{mS} \cdot \cos(\vec{M}_S \cdot \vec{j}),$$

где $\cos(\vec{M} \cdot \vec{j})$ — косинус угла между \vec{M} и \vec{j} ; $\cos(\vec{M}_S \cdot \vec{j})$ — косинус угла между \vec{M}_S и \vec{j} .

Отсюда имеем

$$P_m = \mu_B \cdot g \sqrt{j \cdot (j + 1)}, \quad (3)$$

$$\text{где } g = \frac{1 + j \cdot (j + 1) + S \cdot (S + 1) - L \cdot (L - 1)}{2j \cdot (j + 1)}.$$

Коэффициент g называют *фактором (множителем) Ланде* (немецкий физик-теоретик *Альфред Ланде* (1888 – 1975)).

Найдем связь между магнитным моментом и моментом импульса атома

$$\frac{P_{mL}}{J} = \frac{\frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot g \cdot \sqrt{j \cdot (j+1)}}{\frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{j \cdot (j+1)}},$$

$$P_{mj} = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot g \cdot J.$$

Проекции векторов \vec{P}_m и \vec{J} на любое направление связаны также, как и сами векторы

$$P_{mjz} = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot g \cdot J_z.$$

Проекция момента импульса

$$J_z = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot m \cdot j.$$

Тогда

$$P_{mjz} = \mu_B \cdot g \cdot m_j.$$

На основе квантовой механики можно показать, что для заполненной оболочки $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$ вклад электронов в величину полного момента импульса атома равен нулю. Следовательно, чтобы определить момент импульса атома, следует рассматривать лишь электроны, находящиеся на незаполненных оболочках.

Состояние атома, таким образом, определяется орбитальным \vec{M} и полным \vec{J} моментами импульса электронов, находящихся на незаполненных оболочках атома.

В спектроскопии для обозначения орбитального момента импульса атома употребляются большие буквы по следующей схеме:

$$L = 0, 1, 2, 3, 4, 5.$$

$$S P D F G H.$$

Значение полного момента J пишется внизу справа от буквы, изображающей значение квантового числа L ; возможные значения j при данном L обозначаются цифрой, которая пишется сверху слева. Так, например, ${}^2P_{1/2}$ означает $L = 1$; j может принять два значения и читается как «дуплет P половина»; ${}^3P_2 - L = 1$, $j = 2$ и читается как «триплет P два».

Магнитомеханические явления. Связь между механическим и магнитным моментами установлена на следующем опыте: небольшой

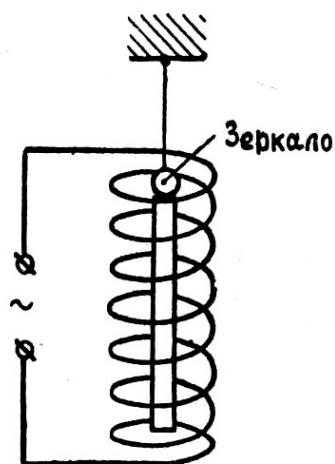


Рис. 3.5

цилиндр из ферромагнитного материала (железа, никеля, кобальта) подвешен на тонкой кварцевой нити и помещен в соленоид (рис. 3.5).

При пропускании электрического тока через соленоид цилиндр намагничивается вдоль магнитного поля соленоида. Все электроны начинают вращаться в одном направлении. Электроны, таким образом, приобретают момент импульса. Но для такой системы (цилиндрика на нити) справедлив закон сохранения импульса, а это означает, что атомы приобретают точно такой же по абсолютной величине момент им-

пульса, но имеющий противоположное направление. Цилиндр (как целое) при включении электрического тока в соленоиде должен повернуться. Угол поворота отмечается по отклонению отраженного луча от зеркальца, закрепленного на нити. Такой опыт был поставлен в 1915 году Эйнштейном и де Гаазом (нидерландский физик *Вандер Йоханнес де Гааз* (1878 – 1960)). Тело при намагничивании вдоль некоторой оси приобретает около последней вращательный импульс, пропорциональный намагниченности (*эффект Эйнштейна – де Гааза*). Эйнштейн и де Гааз наблюдали вращение цилиндрика при его намагничивании. По направлению возникающего момента импульса можно сделать заключение о том, что намагничивание обусловлено движением отрицательных зарядов, т. е. электронов. Из опытов вычислено отношение магнитного момента к моменту импульса

$$\frac{P_m}{L} = -\frac{e}{m_e}.$$

Это отношение равно отношению собственного магнитного момента к собственному (спиновому) моменту импульса электрона.

Этот результат показывает также, что ферромагнетизм вызван не орбитальным движением электронов, он связан со спином электрона.

Правила отбора при излучении атома. В стационарном состоянии атома электроны находятся на самых низких энергетических уровнях. У возбужденных атомов один или несколько электронов поднимаются на более высокие уровни, поэтому часть низших уровней

оказывается незаполненной. В возбужденном состоянии атом длительное время находиться не может (время существования возбужденного состояния порядка 10^{-8} с).

При переходе электрона с высшего уровня на низший освобождается энергия в виде электромагнитного излучения (фотона). Однако незаполненных низших уровней недостаточно для испускания фотона, так как фотон обладает собственным механическим моментом – спином, квантовое число которого $s = +1$. В системе «фотон – атом» действует закон сохранения момента импульса. Излученный фотон уносит момент импульса $s = 1$. На такую же величину должен измениться момент импульса атома. В момент испускания фотона момент импульса может измениться либо за счет изменения орбитального момента M , либо за счет изменения направления собственного момента, либо из-за обеих причин сразу.

Расчет показывает, что при испускании оптических спектров изменение момента импульса атома происходит только за счет изменения орбитального момента импульса M , $\Delta M_s = 0$.

Рассмотрим сложение орбитального момента с единичным моментом (моментом фотона) (рис. 3.6).

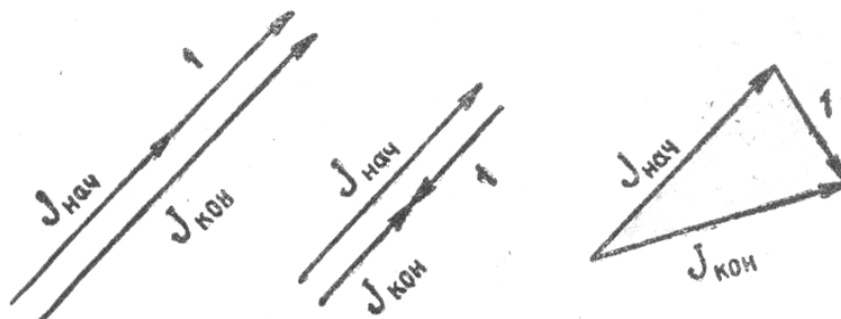


Рис. 3.6

Кроме этих трех случаев могут быть еще два (рис. 3.7). Из рисунков видно: излучение может происходить только тогда, когда

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (\text{при } L_{\text{нач}} \neq 0 \text{ и } L_{\text{кон}} \neq 0);$$

$$\Delta L = \pm 1 \quad (\text{при } L_{\text{нач}} = 0 \text{ и } L_{\text{кон}} \neq 0).$$

Аналогичным способом для квантового числа m найдем $\Delta m_j = 0, \pm 1$.

Если изменение связано с изменением движения одного электрона, то переходы с $L = 0$ невозможны (в атоме водорода и водородоподобных атомах).

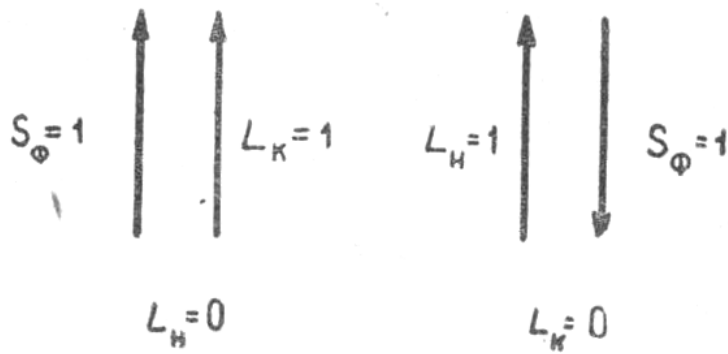


Рис. 3.7

Атом в магнитном поле. Потенциальная энергия атома, помещенного в магнитное поле, определяется следующим выражением:

$$U = U_K + U_{SL} + U_{SB} + U_{LB},$$

где U_K — энергия кулоновского взаимодействия электронов с ядром и между собой; U_{SL} — энергия спин-орбитального взаимодействия; U_{SB} — энергия взаимодействия спинового магнитного момента с магнитным полем; U_{LB} — энергия взаимодействия орбитального магнитного момента с магнитным полем.

Для расчета энергии атома необходимо решать уравнение Шрёдингера с данной потенциальной энергией. Однако точного решения уравнения Шрёдингера нет.

Рассмотрим следующее приближенное решение. Слабое магнитное поле — поле, в котором U_{SB} и $U_{LB} \ll U_{SL}$.

В отсутствие магнитного поля состояние атома определяется квантовыми числами L, S, J . Эти же числа определяют магнитный момент атома \vec{P}_m .

Атом с магнитным моментом, помещенный в магнитное поле, обладает энергией $U = -P_{mB} \cdot B$ и, следовательно, приобретает дополнительную энергию.

Поскольку $P_{mB} = g \cdot \mu_B \cdot B \cdot m_j$, то дополнительная энергия

$$U = -g \cdot \mu_B \cdot B \cdot m_j,$$

где m_j — магнитное квантовое число, принимающее значения $0, j, \pm(j-1), \pm(j-2), \pm \dots$ (всего $2j+1$ значений).

Таким образом, дополнительная энергия атома в магнитном поле зависит от ориентации магнитного момента атома. Число ориентаций магнитного момента равно $2j+1$.

Так,

для $j = \frac{1}{2}$ число ориентаций равно 2, $m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$;

для $j = 1$ число ориентаций равно 3, $m_j = 1, 0, -1$;

для $j = \frac{3}{2}$ число ориентаций равно 4, $m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$;

для $j = 2$ число ориентаций равно 5, $m_j = 2, 1, 0, -1, -2$.

На рис. 3.8 показана зависимость дополнительной энергии для каждой ориентации магнитного момента.

Таким образом, при наложении магнитного поля энергетический уровень атома с магнитным моментом j расщепляется на $2j + 1$ подуровней.

Энергия каждого подуровня определяется выражением

$$E = E_0 = g \cdot \mu_B \cdot B \cdot m_j.$$

На рис. 3.9 показаны расщепления уровней $3^2P_{3/2}$, $3^2P_{1/2}$, $3^2S_{1/2}$. Расстояния между соседними уровнями равны $g \cdot \mu_B \cdot B$, так как m_j для соседнего уровня отличается на единицу.

Второе решение для сильного магнитного поля (когда U_{LB} и $U_{SB} \geq U_{SL}$) Дополнительная энергия атома, помещенного в магнитное поле, определяется выражением

$$\Delta E = g_L \cdot \mu_B \cdot B \cdot m_L + g_S \cdot \mu_B \cdot B \cdot m_S.$$

Поскольку, согласно выражению (3), $g_L = 1$, а $g_S = 2$, получим

$$\Delta E = \mu_B \cdot B \cdot (M_L + 2 \cdot S).$$

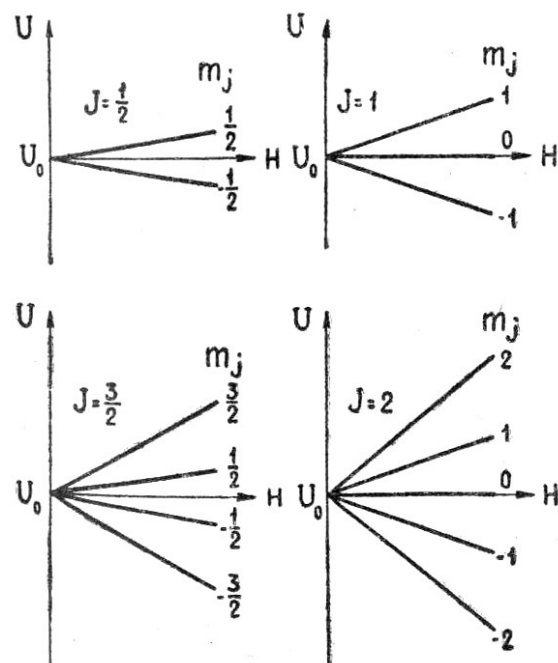


Рис. 3.8

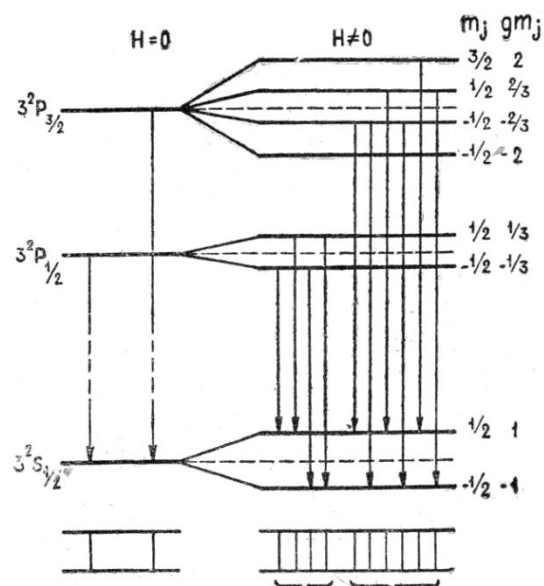


Рис. 3.9

Тогда энергия подуровней атома равна

$$E = E_0 + \mu_B \cdot B \cdot (M_L + 2 \cdot S).$$

Каждый энергетический уровень расщепляется на несколько подуровней. Так, например, для состояний

$$\begin{array}{ccc} 1 & 1/2 & 2 \\ 3^2P_{3/2} & 0 & 1/2 & 1 \\ -1 & 1/2 & 0 \end{array}$$

расстояние между уровнями равно $\mu_B \cdot B$.

Для состояний

$$\begin{array}{ccc} 1 & -1/2 & 0 \\ 3^2P_{1/2} & 0 & -1/2 & -1 \\ -1 & -1/2 & -2 \\ 3^2S_{1/2} & 0 & 1/2 & 1 \\ 0 & -1/2 & -1 \end{array}$$

расстояние между уровнями равно $2\mu_B \cdot B$.

Рассмотрим атом натрия в магнитном поле. Схема расщепления энергетических уровней для натрия показана на рис. 3.10.

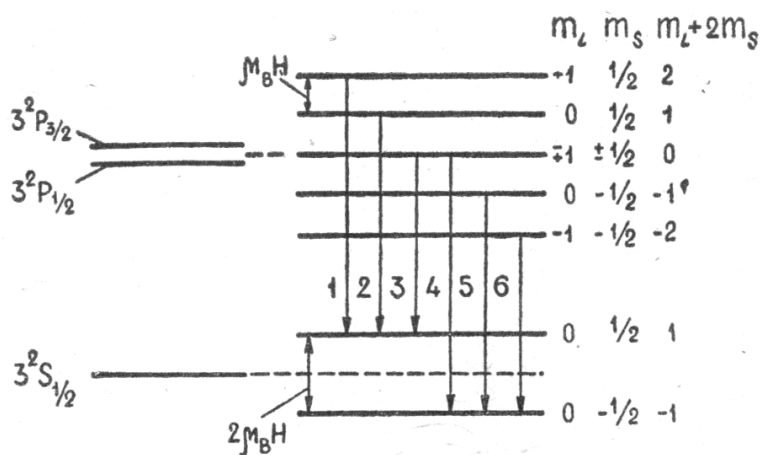


Рис. 3.10

В атоме натрия (Na, $z = 11$) K-оболочки и L-оболочки полностью заполнены. Состояние атома натрия определяется состоянием одиннадцатого электрона. В невозбужденном атоме электрон находится в состоянии $3^2S_{1/2}$.

Первые возбужденные состояния – $3^2P_{1/2}$ и $3^2P_{3/2}$. Атом, переходя из возбужденного состояния в основное, невозбужденное, излучает квант света частотой

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}.$$

Рассмотрим излучение атома натрия.

В слабом магнитном поле

$$E_1 = E_{10} + g_1 \cdot \mu_B \cdot B \cdot m_{j1}; \quad E_2 = E_{20} + g_2 \cdot \mu_B \cdot B \cdot m_{j2}.$$

Частота излучения

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{E_{20} - E_{10}}{h} + \frac{\mu_B \cdot B}{h} (g_2 \cdot m_{j2} - g_1 \cdot m_{j1}).$$

Эта формула позволяет рассчитать частоты, которые будут излучать атомы натрия в слабом магнитном поле. Правило отбора требует $m_{j2} - m_{j1} = \pm 1, 0$.

Если в отсутствие магнитного поля атомы натрия из состояний $3^2P_{1/2}$ и $3^2P_{3/2}$ излучают кванты двух частот, то при слабом магнитном поле излучается десять частот. Расщепление спектральных линий в слабом магнитном поле получило название **аномального явления Зеемана**.

Частота излучения атома натрия в сильном магнитном поле определяется выражением

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{E_{20} - E_{10}}{h} + \frac{\mu_B \cdot B}{h} (m_{L2} - m_{L1} + 2S_2 - 2S_1).$$

Поскольку при излучении оптических спектров $\Delta S = 0$, то частоты излучения натрия

$$\nu = \nu_0 + \frac{\mu_B \cdot B}{h} (m_{L2} - m_{L1}).$$

В соответствии с правилом отбора $m_{L2} - m_{L1} = 0, \pm 1$.

В атоме натрия энергетические уровни $3^2P_{1/2}$ и $3^2P_{3/2}$ в сильном магнитном поле расщепляются на пять подуровней, а уровень $3^2P_{1/2}$ – на два подуровня.

На рис. 3.10 показано шесть возможных переходов из состояний $3^2P_{1/2}$ и $3^2P_{3/2}$ в состояние $3^2P_{1/2}$. Но второй и пятый переходы дают одну частоту ν_0 ; первый и четвертый переходы дают одну линию (частоту)

$$\nu = \nu_0 + \frac{\mu_B \cdot B}{h},$$

третий и шестой переходы дают также одну линию

$$\nu = \nu_0 - \frac{\mu_B \cdot B}{h}.$$

Таким образом, в сильном магнитном поле одна основная линия натрия расщепляется на три. Явление расщепления в магнитном поле основной линии на три было открыто в 1896 году нидерландским физиком *Питером Зееманом* (1865 – 1943) и получило название **нормального эффекта Зеемана**, поскольку оно объяснено с точки зрения классической физики. Действительно,

$$\Delta\nu = \frac{\mu_B \cdot B}{h} = \frac{e \cdot B}{4\pi \cdot m_e}.$$

В формулу не входят ни постоянная Планка, ни квантовые числа. Поэтому эта формула получается и в классической физике. Аномальный эффект Зеемана наблюдался в 1912 году, и объяснить его классическая физика не смогла.

Тестовые вопросы и задачи

Задание 1. Какой набор квантовых чисел характеризует состояние электрона в атоме?

Задание 2. Приведите пример заполнения электронных оболочек в атоме.

Задание 3. Дайте пояснение орбитальному магнитному моменту атома.

Задание 4. В чем физический смысл спинового магнитного момента атома?

Задание 5. Из каких частей состоит потенциальная энергия атома, помещенного в магнитное поле?

Задание 6. В чем суть нормального эффекта Зеемана?

Задание 7. Вычислите момент импульса орбитального движения электрона, находящегося в атоме в *s*-состоянии.

1) 0; 2) 1; 3) 2; 4) 3.

Задание 8. Вычислите спиновый момент импульса электрона.

1) $0,91 \cdot 10^{-34}$ Дж · с; 2) $1,0 \cdot 10^{-34}$ Дж · с; 3) $3,0 \cdot 10^{-34}$ Дж · с; 4) $5,5 \cdot 10^{-34}$ Дж · с.

Задание 9. Вычислите спиновый магнитный момент электрона.

1) $1,6 \cdot 10^{-23}$ А · м²; 2) $2,6 \cdot 10^{-23}$ А · м²; 3) $3,1 \cdot 10^{-23}$ А · м²; 4) $6,6 \cdot 10^{-23}$ А · м².

Задание 10. Используя принцип Паули, укажите, какое максимальное число электронов в атоме могут иметь одинаковые квантовые числа *n*, *l*, *m*.

1) 1; 2) 2; 3) 4; 4) 6.

Тема 4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

Теоретический материал

Спонтанное излучение. Поглощение. Индуцированное излучение. Электронный парамагнитный резонанс. Квантовые генераторы. Эффект Мёссбауэра.

Спонтанное излучение. Рассмотрим изолированную систему, состоящую из N атомов, энергия которых может иметь два значения: E_1 и E_2 . Число атомов, имеющих энергию E_1 , равно N_1 , а число атомов, имеющих энергию E_2 , равно N_2 . Числа N_1 и N_2 определяются из закона Больцмана распределения частиц по энергиям.

Состояние с энергией E_1 – основное, с энергией E_2 – возбужденное. В возбужденном состоянии атом не может находиться длительное время. Он переходит самопроизвольно (спонтанно) в основное состояние и излучает квант света

$$h \cdot \nu = E_2 - E_1,$$

Такое излучение называют **спонтанным**.

Обозначим через $A_{21} \cdot dt$ вероятность перехода атома из возбужденного состояния в основное ($2 \rightarrow 1$) за время dt . Тогда за время dt из состояния 2 в состояние 1 перейдут спонтанно

$$dN_2 = -N_2 \cdot A_{21} \cdot dt$$

атомов. Знак «минус» указывает на убывание числа N_2 .

Проинтегрировав это выражение и полагая, что при $t = 0$ $N_2 = N_{20}$, найдем

$$N_2 = N_{20} \cdot e^{-A_{21} \cdot t}.$$

Это выражение представляет собой закон спонтанного излучения. За время $\tau = \frac{1}{A_{21}}$ число атомов N_2 уменьшается в e раз. Это время (порядка 10^{-8} с) называют *средним временем «жизни» атома в возбужденном состоянии*.

Поглощение. Индуцированное излучение. Пусть на систему падает излучение частотой

$$h \cdot \nu = E_2 - E_1.$$

При столкновении фотона $h \cdot \nu$ с атомом, имеющим энергию E_1 , происходит поглощение фотона и атом переходит в состояние E_2 (рис. 4.1). Если фотон сталкивается с атомом, имеющим энергию E_2 , происходит излучение фотона $h \cdot \nu = E_2 - E_1$, и атом переходит в состояние с энергией E_1 . Такое излучение называют **индуцированным**.

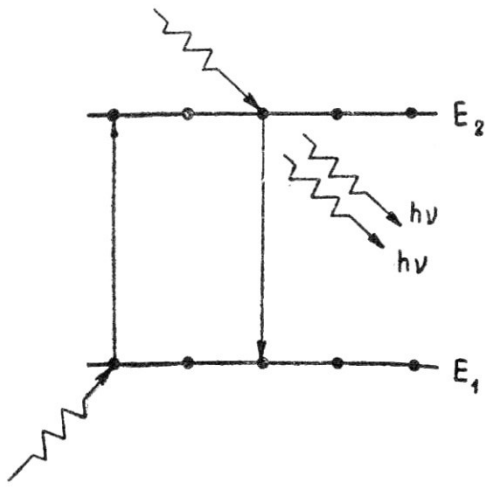


Рис. 4.1

Падающий и излученный фотоны совершенно одинаковы: они имеют одинаковую частоту, одинаковое направление распространения и одинаковую поляризацию. Обозначим через w_{12} вероятность того, что за одну секунду атом перейдет из состояния с энергией E_1 в состояние с энергией E_2 и поглотит фотон $h \cdot \nu = E_2 - E_1$. Тогда за одну секунду будет $z_1 = N_1 \cdot w_{12}$ переходов. Из падающего света с плотностью излучения $u_\nu = h \cdot \nu \cdot n$ (n – число фотонов в единице объема) поглотится энергия $P_1 = h \cdot \nu \times N_1 \cdot w_{12}$.

Если w_{21} – вероятность того, что за одну секунду атом под действием излучения перейдет из состояния с энергией E_2 в состояние с энергией E_1 и излучит фотон $h \cdot \nu = E_2 - E_1$, тогда за одну секунду произойдет $z_2 = N_2 \cdot w_{21}$ переходов и излучится энергия $P_2 = h \cdot \nu \cdot N_2 \cdot w_{21}$.

Полная энергия излучения за одну секунду

$$P_\nu = P_2 - P_1 = h \cdot \nu \cdot (N_2 \cdot w_{21} - N_1 \cdot w_{12}),$$

где P_ν – мощность излучения.

В квантовой механике доказывается, что $w_{21} = w_{12}$. Равенство вероятностей переходов в прямом и обратном направлениях носит название **принципа детального равновесия**. Тогда мощность излучения

$$P_\nu = h \cdot \nu \cdot w_{12} \cdot (N_2 - N_1).$$

При $N_1 > N_2$, $P_\nu < 0$ происходит поглощение энергии из излучения, при $N_2 > N_1$, $P_\nu > 0$ – индуцированное излучение. Таким образом, чтобы происходило индуцированное излучение, необходимо, чтобы $N_2 > N_1$, в то время как в обычных условиях $N_1 > N_2$.

Электронный парамагнитный резонанс. В магнитном поле \vec{B} энергетические уровни атома, имеющего магнитный момент P_m , расщепляются на подуровни. Энергетическое расстояние между уровнями

равно $g \cdot \mu_B \cdot B$. Самопроизвольные (спонтанные) переходы между подуровнями запрещены. Однако если на систему атомов, находящихся в магнитном поле \vec{B} , направить электромагнитное излучение частоты

$$\nu = \frac{g \cdot \mu_B \cdot B}{h}, \quad (4)$$

то оно вызовет переходы между подуровнями с поглощением фотонов $h \cdot \nu$.

Оценим частоту излучения, вызывающего такие переходы. Для электронов $g = 2$, $\mu_B = 0,927 \cdot 10^{-23}$, Дж/Тл. Положив $B = 0,3$ Тл, найдем

$$\nu = \frac{2 \cdot 0,927 \cdot 10^{-23} \cdot 0,3}{6,62 \cdot 10^{-34}} = 10^4 \text{ МГц.}$$

Полученная частота лежит в области сверхвысокочастотного диапазона (СВЧ-диапазона).

Резкое поглощение излучения СВЧ-диапазона атомами, находящимися в магнитном поле, получило название **электронного парамагнитного резонанса (ЭПР)**.

Явление ЭПР было открыто в 1944 году *Е. К. Завойским* (1907 – 1976). Оно наблюдалось на установке, приведенной на рис. 4.2.

Исследуемое вещество 1 помещено в резонатор 2. Источник СВЧ-излучения – клистрон 3. От него по волноводу 4 электромагнитное излучение СВЧ-диапазона поступает в резонатор, проходит через объект и попадает в регистрирующее устройство 5. Сигнал регистрируется осциллографом в виде импульса. Частота излучения ν постоянна. Магнитное поле создается магнитом 6. Величина магнитной индукции колеблется около значения \vec{B}_0 , при котором выполняется условие (4). В тот момент, когда индукция магнитного поля равна \vec{B}_0 , поглощение вещества резко возрастает. Сигнал, поступающий в регистрирующее устройство, уменьшается.

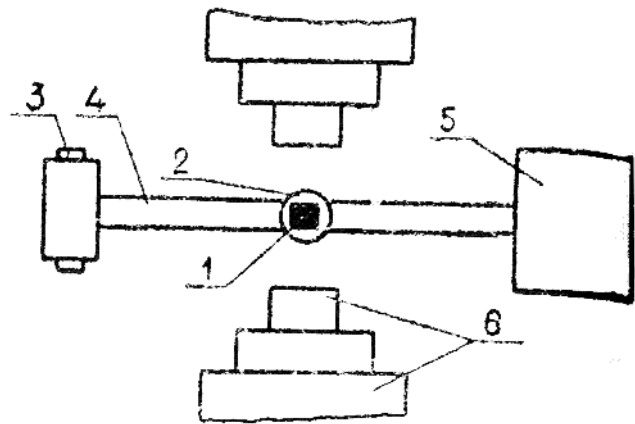


Рис. 4.2

С помощью ЭПР определяются магнитные моменты атомов, особенности строения молекул и кристаллов, исследуется кинетика химических реакций.

Явление магнитного резонанса наблюдается у любых частиц, обладающих магнитным моментом \vec{P}_m , в частности у ядер атомов. Магнитный момент ядра атома измеряется в единицах, равных ядерному магнетону, который в $\frac{m_p}{m_e}$ раз меньше магнетона Бора. Здесь m_p – масса протона, m_e – масса электрона. Ядерный магнетон

$$\mu_y = \frac{e h}{4 \cdot \pi \cdot m_p} = 5,5 \cdot 10^{-27} \text{ Дж/Тл.}$$

С помощью ядерного резонанса (как и для ЭПР) определен магнитный момент протона, который равен $P_m = 2,79 \cdot \mu_y$.

Здесь следует отметить, что протон – ядерно-активная частица, так как она участвует не только в электромагнитных, но и в ядерных взаимодействиях.

Квантовые генераторы. Источники электромагнитного излучения, основанные на использовании индуцированного излучения, называют **квантовыми генераторами**. Квантовый генератор, излучающий электромагнитные волны в области видимого света, получил название **лазера**. Генератор, излучающий электромагнитные волны в области инфракрасных лучей, называют **мазером**.

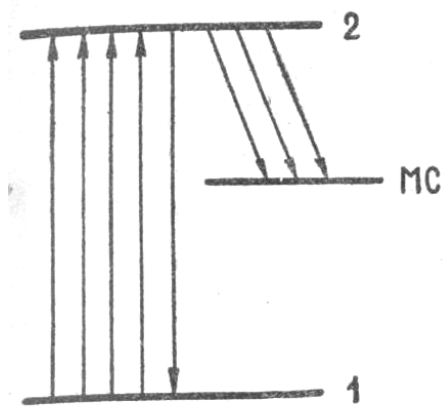


Рис. 4.3

Исследования в области квантовых генераторов выделились в отдельный раздел физики – *квантовую электронику*. Лазер – это оптический квантовый генератор (аббревиатура от английской фразы Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation – «усиление света в результате вынужденного излучения»), источник оптического когерентного излучения, характеризующегося высокой направленностью и большой плотностью энергии. В 1958

году советские (А. М. Прохоров (1916 – 2002) и Н. Г. Басов (1922 – 2001)) и американский (Ч. Таунс (1915 – 2015)) физики создали первые лазеры.

В качестве рабочего вещества могут выступать как твердые тела, так и газы. Атомы рабочего вещества должны иметь по крайней мере три энергетических уровня (рис. 4.3), которые удовлетворяют следую-

щим требованиям: первый – основной, долгоживущий; второй – достаточно широкий, короткоживущий; третий – метастабильный (МС), долгоживущий.

В схеме устройства квантового генератора рабочее вещество помещено между двумя параллельными зеркалами Z_1 и Z_2 (рис. 4.4). Одно из зеркал полупрозрачное. Рабочее вещество облучает внешний источник, кванты излучения которого $h \cdot \nu > E_2 - E_1$.

При работе внешнего источника его излучение поглощается атомами рабочего вещества. Начинается заселение второго уровня. Поскольку второй уровень короткоживущий, одновременно начинаются спонтанные переходы с излучением или без излучения на метастабильный уровень. В метастабильном состоянии атомы могут находиться довольно длительное время.

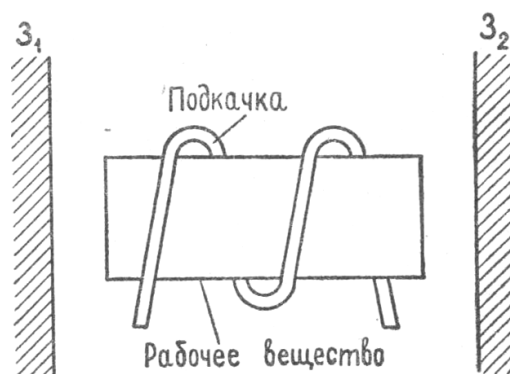


Рис. 4.4

Если при спонтанном излучении с метастабильного уровня фотон распространяется не перпендикулярно зеркалам, то он покинет рабочее вещество, не вызвав индуцированного излучения, так как мала вероятность встречи. Если же фотон, возникающий при спонтанном излучении, с метастабильного уровня распространяется перпендикулярно зеркалам, то, пролетая многократно от зеркала к зеркалу и сталкиваясь с атомами, находящимися в метастабильном состоянии, он будет вызывать индуцированное излучение, которое выходит через полупрозрачное зеркало.

По способу работы лазеры делят на источники *импульсного* и *непрерывного действия*. По рабочему веществу лазеры могут быть *газовыми*, *жидкостными* и *твердотельными* (на диэлектрических кристаллах, стеклах, полупроводниках).

Лазерный луч обладает высокой степенью монохроматичности: полоса испускаемых длин волн не превышает 1\AA (10^{-10} м). Лазерный луч лежит в очень малом телесном угле. Расходимость пучка определяется дифракцией на отверстии с диаметром, равным диаметру светящегося тела.

Лазерный луч полностью поляризован. Направление поляризации в различных импульсах может меняться случайным образом. Практически поляризация определяется несовершенством системы,

например разницей коэффициентов поглощения и отражения зеркал для света с различными направлениями поляризации.

К настоящему времени лазеры получили широкое применение в научных исследованиях (физике, химии, биологии, археологии и др.), практической медицине (хирургии, офтальмологии и др.), а также в технике (маталлообработке, связи, обработке информации и т. п.).

Эффект Мёссбауэра. Немецкий физик *Р. Л. Мёссбауэр* (1929 – 2011), исследуя резонансное поглощение и рассеяние гамма-квантов, открыл в 1958 году ядерный гамма-резонанс без отдачи ядра. Это упругое испускание или поглощение квантов атомными ядрами, связанными в твердом теле, называли **эффектом Мёссбауэра**. Слово «упругое» означает отсутствие излучения и поглощения фотонов.

Рассмотрим эффект Мёссбауэра более подробно. Пусть в ядре атома излучателя имеется возбужденный уровень с энергией E_0 . Переходя с возбужденного уровня на невозбужденный, будет излучаться γ -квант с энергией E_0 , который можно рассматривать как электромагнитное излучение с частотой $\nu = \frac{E_0}{h}$ в соответствии с формулой $E_0 = h \cdot \nu$. Но γ -квант можно рассматривать и как частицу, вылетающую с некоторой скоростью.

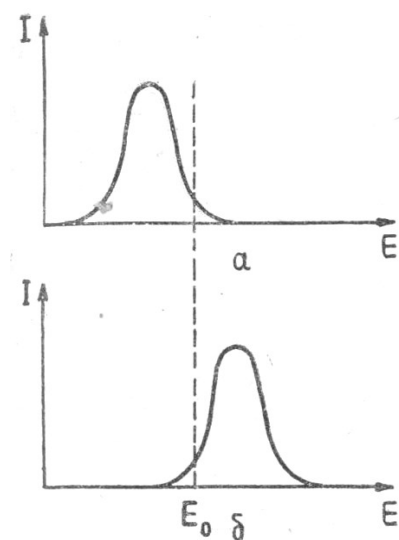


Рис. 4.5

В связи с тем, что температура излучателя больше абсолютного нуля, его атомы находятся в тепловом движении. В случае газов и жидкостей это поступательное движение, а в случае твердого тела – колебательное движение относительно узлов кристаллической решетки. Скорость γ -кванта геометрически складывается со скоростью поступательного движения ядра, т. е. энергия γ -кванта будет отличаться от E_0 на некоторую величину E , увеличивающую с ростом температуры.

Поэтому линия излучения достаточно широка (рис. 4.5, а). По оси ординат отложена интенсивность излучения γ -квантов с данной энергией E . γ -квант обладает некоторой массой. В соответствии с законом сохранения импульса ядро, излучая γ -квант, испытывает «отдачу» подобно ружью при выстреле. Энергия излучения

уменьшается на величину энергии отдачи, и линия излучения сдвигается относительно E_0 в сторону больших энергий (рис. 4.6, б). Из совместного рассмотрения рис. 4.5, а и 4.6, б видно, что вероятность поглощения некоторым ядром γ -кванта, испущенного таким же ядром, в обычных условиях чрезвычайно мала. Это неупругое (нерезонансное) испускание и поглощение, так как ядро приобретает энергию отдачи ΔE , что может рассматриваться как излучение некоторой частицы фотона с энергией ΔE .

Следует отметить, что системе, содержащей излучающее или поглощающее ядро, передается энергия $\Delta E \approx \frac{E_0^2}{2 \cdot M \cdot c^2}$, такая, как будто ядро с массой M свободно и неподвижно.

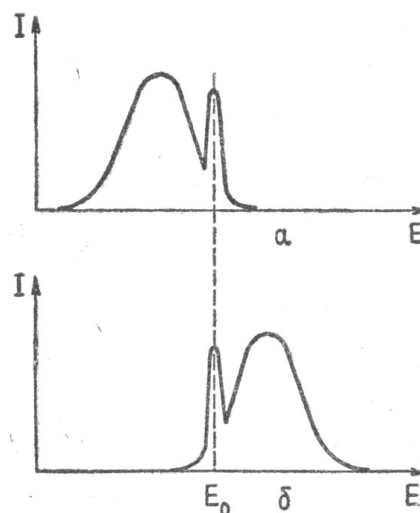


Рис. 4.6

Если энергия квантов колебаний системы больше энергии отдачи ($h \cdot \nu_k > \Delta E$), то излучение и поглощение может произойти без отдачи, т. е. резонансно.

Вероятность такого процесса мала, но она отлична от нуля. Таким образом, линии излучения и поглощения при $E = E_0$ имеют пик резонансного поглощения и излучения, естественная ширина которого очень мала (см. рис. 4.6).

Обычно резонансное поглощение и излучение выражено очень слабо, однако можно создать условия, при которых излучение и поглощение γ -квантов будет упругим, т. е. $\Delta E = 0$, или энергия отдачи будет скомпенсирована каким-либо способом.

Мёссбауэр изучил резонансное поглощение квантов с энергией $E_0 = 129$ кэВ, испускаемых иридием Ir^{192} из первого возбужденного состояния в основное состояние. Источником γ -лучей служил β -радиоактивный осмий Os^{191} . Схема ядерных переходов изображена на рис. 4.7. Источник помещался на диске, направление и скорость вращения которого

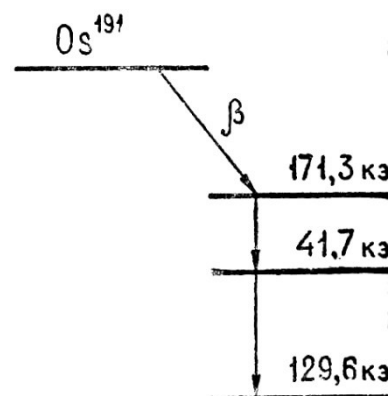


Рис. 4.7

могли изменяться. Поглотитель – пластинка металлического иридия. Источник и фильтры поддерживались при температуре жидкого азота. В опыте нужна низкая температура, так как при ней усиливается связь атомов, растет M , а энергия отдачи уменьшается. Нерезонансное поглощение измерялось с помощью платинового поглотителя.

Схема установки изображена на рис. 4.8.

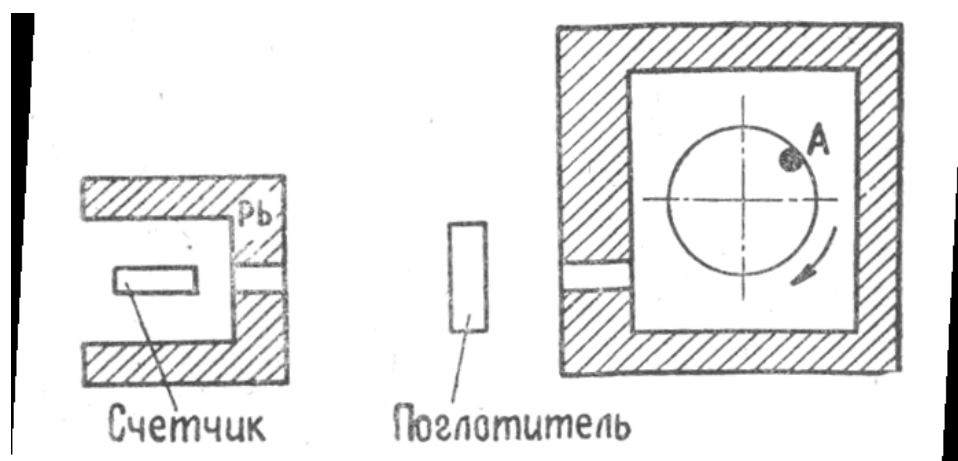


Рис. 4.8

Результаты опыта приведены на рис. 4.9. С помощью эффекта Мёссбауэра исследуются движения материков. Красное смещение лучей в гравитации можно наблюдать при γ -излучении, направленном вверх и вниз.

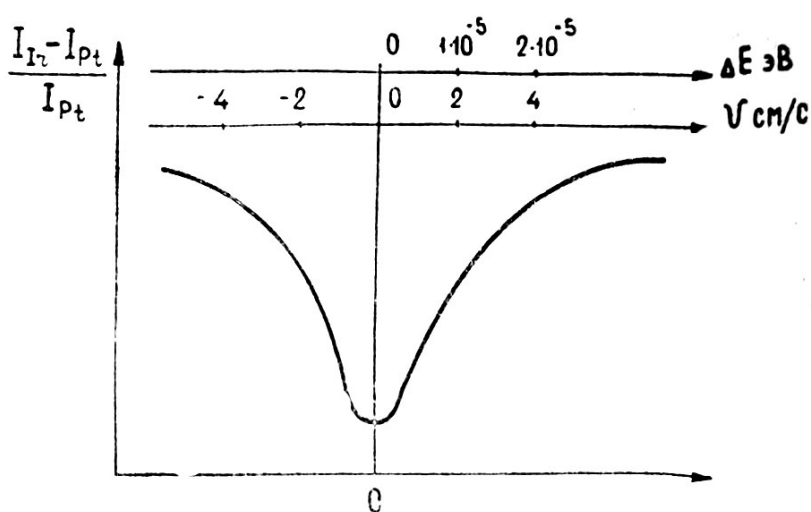


Рис. 4.9

Тестовые вопросы и задачи

Задание 1. Напишите и поясните закон спонтанного излучения.

Задание 2. Дайте определение индуцированного излучения.

Задание 3. В каком диапазоне частот наблюдается явление электронного парамагнитного резонанса?

Задание 4. Какие характеристики атомов и молекул можно определить с помощью электронного парамагнитного резонанса?

Задание 5. В чем состоит принцип работы лазера?

Задание 6. Какое место занимают лазеры в жизни человека? Приведите примеры.

Задание 7. В чем заключается эффект Мёссбауэра?

Задание 8. Дайте пояснение резонансного поглощения в эффекте Мёссбауэра.

Задание 9. Поясните опыт по наблюдению резонансного поглощения квантов.

Задание 10. В каких областях науки можно применить эффект Мёссбауэра?

Тема 5. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФЕРМИ

Теоретический материал

Неразличимость частиц. Фазовое пространство. Критерий вырождения. Распределение Ферми – Дирака. Электронный газ в металле при абсолютном нуле ($T = 0$). Распределение Ферми при температурах больше абсолютного нуля.

Неразличимость частиц. Известно, что кристалл представляет собой сложную систему, состоящую из большого числа микрочастиц – атомных ядер и электронов.

Из большого числа частиц выберем две и пометим их номерами 1 и 2. Если эти частицы классические, т. е. их движение описывается законами Ньютона, то для любого момента времени всегда можно указать, где находится первая частица, а где вторая, поскольку каждая частица движется по своей траектории, т. е. частицы вполне различимы друг от друга.

В силу соотношения неопределенности понятие траектории к квантовой частице неприменимо. Если в какой-то момент времени пометим микрочастицы номерами 1 и 2, то в следующий момент времени уже невозможно будет указать, где находится первая микрочастица, а где вторая. Микрочастицы можно обнаружить в том или ином месте, а сказать, какая это частица, первая или вторая, невозможно. Таким образом, мы приходим к представлению о неразличимости, или тождественности, микрочастиц.

По характеру поведения в системе микрочастицы делят на две большие группы – *фермионы* и *бозоны*.

Опыт показывает, что фермионы обладают полуцелым спином, т. е. $\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$, $\frac{3}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$, $\frac{5}{2} \cdot \frac{h}{2\pi}$ и т. д.; бозоны – целочисленными значениями спина $\frac{h}{2\pi}$, $\frac{2h}{2\pi}$, $\frac{3h}{2\pi}$ и т. д. Фермионы подчиняются принципу Паули, бозоны не подчиняются.

Из элементарных частиц к фермионам относят электроны, протоны, нейтроны, ядра химических элементов, состоящие из нечетного числа нуклонов; к бозонам – фотоны, π -мезоны и атомные ядра с четным числом нуклонов. Между фермионами существуют силы отталкивания, между бозонами – силы притяжения. Эти силы получили название *сил обменного взаимодействия*. Мы будем рассматривать только фермионы.

Фазовое пространство. Состояние классической частицы известно, если известны импульсы и координаты, т. е. состояние частицы описывается шестью величинами (x, y, z, p_x, p_y, p_z) .

Если построить шестимерное пространство с осями $OX, OY, OZ, OP_x, OP_y, OP_z$, то в этом пространстве состояние частицы в каждый момент времени будет выражаться точкой с координатами (x, y, z, p_x, p_y, p_z) . Такое пространство называют *фазовым*, а точку, определяющую состояние частицы, – *фазовой*. В процессе движения состояние частицы изменяется, фазовые точки в фазовом пространстве описывают кривую, которую называют *траекторией*. Например, для одномерного движения частицы под действием постоянной силы $x = \frac{a \cdot t^2}{2}$, $p_x = m \cdot a \cdot t$. Отсюда, исключая время, находим *фазовую траекторию*.

Фазовая траектория представляет собой параболу. Для осциллятора $x = A \cdot \sin \omega \cdot t$, $p_x = m \cdot \omega \cdot A \cdot \cos \omega \cdot t$ фазовая траектория – эллипс

$$\frac{p_x^2}{m^2 \cdot A^2 \cdot \omega^2} + \frac{x^2}{A^2} = 1.$$

Величину $d\tau = dx \cdot dy \cdot dz \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z$ называют *элементом объема фазового пространства*.

Для свободных частиц, т. е. частиц, не подверженных действию внешнего поля, поскольку в трехмерном пространстве (x, y, z) на них не наложены никакие ограничения, удобно пользоваться трехмерным пространством импульсов (p_x, p_y, p_z) .

Элемент объема фазового пространства

$$d\tau = V \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z,$$

где V – объем, в котором находятся частицы.

Однако фазовая точка в силу соотношения неопределенностей не описывает состояние квантовой частицы.

Квантовая частица в фазовом пространстве занимает определенный объем – фазовую ячейку, равную

$$\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = h^2,$$

так как $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$, $\Delta y \cdot \Delta p_y = h$, $\Delta z \cdot \Delta p_z = h$.

Говорят, что фазовое пространство микрочастицы квантуется.

Это соотношение – следствие принципа неопределенности Гейзенберга, из чего следует, что положение частицы в фазовом пространстве можно определить только с точностью до объема ячейки. Где

находится частица внутри ячейки, определенно сказать невозможно, поэтому деление фазового пространства на более мелкие ячейки совершенно бессмысленно, так как указать, в какой из более мелких ячеек окажется частица, нельзя.

В качестве примера рассмотрим фазовое пространство квантового осциллятора.

Энергия осциллятора равна сумме кинетической и потенциальной энергий

$$E = E_K + E_{II},$$

где $E_K = \frac{p_x^2}{2 \cdot m}$, $E_{II} = \frac{k \cdot x^2}{2}$. Подставив значения E_K и E_{II} в формулу, получим фазовую траекторию осциллятора

$$\frac{x^2}{2 \cdot E / m \cdot \omega^2} + \frac{p_x^2}{2 \cdot m \cdot E} = 1,$$

т. е. эллипс с полуосями $a = \sqrt{\frac{2 \cdot E}{m \cdot \omega^2}}$, $b = \sqrt{2 \cdot m \cdot E}$.

Площадь, описываемая фазовой траекторией, $S = \pi \cdot a \cdot b = \frac{E}{\nu}$.

Энергия квантового осциллятора $E = h \cdot \nu \cdot (v + \frac{1}{2})$, где $v = 0, 1, 2 \dots$

Отсюда находим $S_v = h \cdot (v + \frac{1}{2})$.

Фазовое пространство квантовано. Площадь между отдельными квантами пространства $S_{v+1} - S_v = h$. Плоское фазовое пространство состоит из ячеек размером h . Каждой ячейке соответствует энергия E квантового осциллятора. Если движение квантовой частицы ограничено объемом V , то удобно пользоваться трехмерным пространством импульсов. Элементарная ячейка в пространстве импульсов

$$\Delta p_X \cdot \Delta p_Y \cdot \Delta p_Z = \frac{h^3}{V}.$$

Подсчитаем число фазовых ячеек в интервале импульсов от p до $p + dp$, где $p^2 = p_X^2 + p_Y^2 + p_Z^2$; в пространстве импульсов проведем две сферы радиусами p и $p + dp$. Объем шарового слоя равен $4 \cdot p^2 \cdot dp$. Число ячеек в шаровом слое $\frac{4 \cdot p^2 \cdot dp}{h^3}$. Если частица обладает спином, то в каждой ячейке может быть $(2s + 1)$ состояний. Таким образом, в интервале импульсов от p до $p + dp$ может быть $dz = (2s + 1) \cdot \frac{4 \cdot p^2 \cdot dp}{h^3} \cdot V$ состояний.

Теперь подсчитаем число состояний с энергиями в интервале от E до $E + dE$. Известно, что $E = \frac{p^2}{2 \cdot m}$, $E = \frac{p \cdot dp}{m}$.

Подставив эти значения в предыдущее уравнение, получим число состояний в интервале энергий от E до $E + dE$

$$dz = (2s + 1) \cdot \frac{2 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot (2m)^{3/2} \cdot E^{1/2} \cdot dE. \quad (5.1)$$

Для одинаковых интервалов dE количество ячеек увеличивается с ростом E . С повышением энергии E число состояний растет пропорционально $E^{1/2}$ (рис. 5.1).

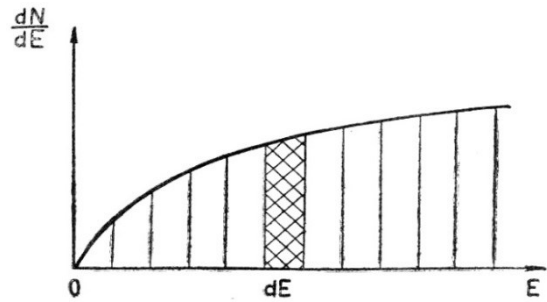


Рис. 5.1

Критерий вырождения. Проинтегрировав выражение (5.1) в пределах от 0 до E , получим число состояний в интервале энергий от 0 до E

$$z = (2s + 1) \cdot \frac{2 \cdot \pi \cdot V}{h^3} \cdot \frac{2}{3} (2m)^{3/2} \cdot E^{3/2}.$$

Если число частиц будет много меньше числа состояний, т. е. $\frac{N}{z} \ll 1$, значит, что микрочастицы находятся на больших расстояниях друг от друга (известно, что фермионы отталкиваются друг от друга) и специфические силы между фермионами не сказываются на состоянии всей системы микрочастиц. Такой газ называют невырожденным.

Если $\frac{N}{z} \approx 1$, т. е. число возможных состояний сравнимо с числом микрочастиц, то на состоянии системы микрочастиц сказываются обменные силы взаимодействия. Такой газ называют вырожденным.

Рассмотрим электронный газ в металле. Установив, что $E = \frac{3}{2} kT$, $\frac{N}{V} = 10^{28} \text{ м}^{-3}$, $m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $T = 300 \text{ К}$, найдем

$$\frac{N}{z} = \frac{N}{V} \cdot \left(\frac{h^2}{2\pi \cdot k \cdot T \cdot m} \right)^{3/2} = 10^{28} \cdot \left(\frac{(6,63 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,4 \cdot 10^{-23} \cdot 300} \right)^{3/2} \gg 1.$$

Таким образом, электронный газ вырожден.

Теперь рассмотрим электронный газ в полупроводниках. При $E = \frac{3}{2} kT$, $\frac{N}{V} = 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $T = 300 \text{ К}$ получим $\frac{N}{z} \ll 1$, следовательно, электронный газ в полупроводниках невырожден. Электроны подчиняются распределению Больцмана.

Распределение Ферми – Дирака. Характер заполнения микрочастицами ячеек фазового пространства был изучен итальяским физиком *Энрико Ферми* (1901 – 1954) и английским физиком *Полем Дираком* (1902 – 1984). Они нашли функцию распределения фермионов по фазовым ячейкам

$$f = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}, \quad (5.2)$$

где E – энергия, соответствующая заполняемой ячейке; μ – энергия Ферми; k – постоянная Больцмана.

Функция распределения выражает вероятность заполнения фазовых ячеек фермионами. Умножив выражение (5.2) на выражение (5.1), получим число микрочастиц, имеющих энергию в интервале от E до $E + dE$. Получим

$$dN = (2s + 1) \cdot \frac{2\pi V}{h^3} \cdot (2m)^{3/2} \cdot E^{1/2} \cdot \frac{dE}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (5.3)$$

Электронный газ в металле при абсолютном нуле ($T = 0$). Для электронов $s = \frac{1}{2}$, $2s + 1 = 2$. При абсолютном нуле функция распределения

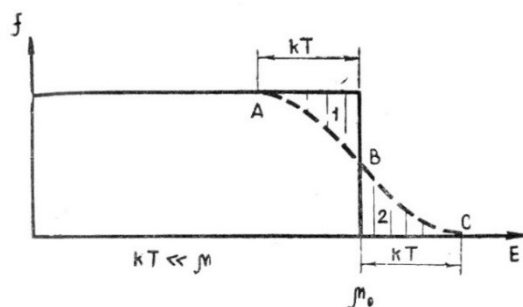


Рис. 5.2

Ферми – Дирака принимает следующие значения: $f = 1$ при $E < \mu$; $f = 0$ при $E > \mu$. Это означает, что энергия электронов в металле при $T = 0$ не может быть больше μ (на рис. 5.2 сплошная линия). Вероятность заполнения ячеек при $E > \mu$ равна нулю, а при $E < \mu$ – единице.

Распределение электронов в металле по энергиям при абсолютном нуле находим из выражения (5.3)

$$dN = \frac{k\pi V}{h^3} \cdot (2m)^{3/2} \cdot E^{1/2} dE.$$

Распределение электронов по энергиям приведено на рис. 5.1.

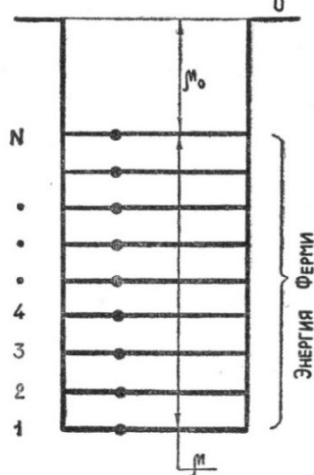


Рис. 5.3

Свободные электроны в металле находятся в своеобразной потенциальной яме (рис. 5.3). Для того чтобы электрон покинул металл (выскочил из потенциальной ямы), требуется затратить энергию на преодоление связей, удерживающих электрон в металле; энергия же

электрона, покинувшего металл и находящегося в покое, равна нулю. Горизонтальные линии показывают энергии, соответствующие фазовым ячейкам. Электроны последовательно заполняют фазовые ячейки, начиная от самых малых энергий. N -й электрон (последний) принимает энергию, равную μ . Энергетический уровень μ_0 , соответствующий этому состоянию, называют *уровнем Ферми*. Уровень Ферми относительно нулевого уровня отрицателен. Но энергия электрона, занимающего этот уровень, относительно дна потенциальной ямы положительна. Эту энергию электрона называют *энергией Ферми*.

Таким образом, энергия электронов в металле даже при абсолютном нуле не равна нулю.

Энергию Ферми можно подсчитать из условия: число электронов в металле при абсолютном нуле равно числу состояний в интервале энергии от нуля до μ , т. е.

$$N = \frac{4\pi V}{h^3} \cdot (2m)^{3/2} \cdot \int_0^{\mu} E^{1/2} dE = \frac{8TV}{3 \cdot h^3} 2(m \cdot \mu)^{3/2},$$

откуда находим

$$\mu = \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3} \cdot \frac{h^2}{2 \cdot m},$$

где $n = \frac{N}{V}$ – число электронов в единице объема. Установив, что $\mu = \frac{3}{2} kT_F$, найдем температуру, соответствующую этой энергии. Расчеты показывают, что она порядка 10^4 К. Для лития $T_F = 5,5 \cdot 10^4$ К, для меди $T_F = 5,58 \cdot 10^4$ К, для серебра $T_F = 5,0 \cdot 10^4$ К.

При $T > T_F$ электронный газ становится невырожденным.

Температура существования металлов в твердом состоянии на два порядка ниже T_F . Так, например, температура плавления лития 459 К, меди 1356 К, серебра 1233 К. Электронный газ в металле всегда вырожден.

Распределение Ферми при температурах больше абсолютного нуля. При абсолютном нуле электроны металла занимают все энергетические уровни ниже уровня Ферми. С повышением температуры электроны металла подвергаются тепловому возбуждению, их энергия может быть больше, чем энергия, соответствующая уровню Ферми. Как известно, металл существует в твердом состоянии при температурах много меньше температуры T_F , т. е. $kT \ll \mu$. Поэтому тепловому возбуждению подвергаются электроны, энергия которых близка к уровню

Ферми и отличается от энергии Ферми на величину порядка kT . Поскольку энергия теплового возбуждения kT много меньше энергии Ферми, то электроны, находящиеся на более глубоких уровнях, не подвергаются тепловому возбуждению. Часть электронов, имеющих энергию меньше μ , при $T > 0$ перейдет в состояния с энергией больше μ . Распределение Ферми для $T > 0$ показано пунктиром на рис. 5.2.

Оценим, какое количество электронов при температуре T будет иметь энергию больше μ . Для простоты рассуждений будем считать, что энергетические уровни электронов отдалены друг от друга на одинаковые расстояния, а именно

$$\Delta E = \frac{\mu}{N/2} = \frac{2\mu}{N}.$$

В интервале энергии от 0 до μ располагается $\frac{N}{2}$ энергетических уровней (на каждом энергетическом уровне два электрона), N – число свободных электронов.

Тепловому возбуждению подвергаются электроны, энергия которых меньше уровня Ферми в полоске kT . Число уровней, лежащих в этой полоске, равно $\frac{kT}{2\mu} N$; на них располагается $2 \frac{kT}{2\mu} N$ электронов.

Полагая, что из этого числа электронов за уровень Ферми переходит половина, получим приближенное значение

$$\Delta N = \frac{kT}{2\mu} N.$$

При комнатной температуре $kT = 0,025$ эВ, $\mu = 3$ эВ, поэтому $\frac{\Delta N}{N} = 0,008$. Из всего числа свободных электронов металла только одна сотая часть подвергается тепловому возбуждению. Электронный газ в металле является вырожденным при любых температурах.

Отсюда понятно, почему во всех тепловых явлениях доля энергии, вносимая вырожденным электронным газом, очень мала. Оценим величину теплоемкости вырожденного электронного газа. Энергия, затрачиваемая на возбуждение электронов в металле,

$$\Delta E = kT \cdot \Delta N = kT \cdot N \frac{kT}{2\mu}.$$

Для одного киломоля, отдающего в электронный газ по одному электрону от каждого атома, N_0 равно числу Авогадро; $N_0 k = R$ – универсальная газовая постоянная.

Отсюда

$$C_{\text{Э}} = \frac{d(\Delta E)}{dT} = R \cdot \frac{kT}{\mu}.$$

Теплоемкость невырожденного одноатомного газа равна $C_V = \frac{3}{2}R$. Следовательно, $C_{\text{Э}} = \frac{3}{2}C_V \cdot \frac{kT}{\mu}$.

При комнатной температуре теплоемкость вырожденного электронного газа составляет одну сотую теплоемкости одноатомного невырожденного газа.

Тестовые вопросы и задачи

Задание 1. Какие частицы относятся к фермионам, а какие – к бозонам?

Задание 2. В чем отличие фермионов от бозонов?

Задание 3. Дайте определение фазового пространства квантового осциллятора.

Задание 4. В чем отличие вырожденного газа от невырожденного? Каков критерий вырожденности?

Задание 5. В чем физическая сущность распределения Ферми – Дирака?

Задание 6. Нарисуйте и поясните распределение Ферми – Дирака.

Задание 7. Что такое электронный газ?

Задание 8. Как определяют уровень Ферми?

Задание 9. Что такое температура Ферми?

Задание 10. Как определяют теплоемкость вырожденного электронного газа?

Тема 6. ЭЛЕМЕНТЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ

Теоретический материал

Состояние изолированного атома. Состояние атома в кристалле. Расщепление энергетических уровней. Приближение сильно-связанных электронов. Движение электрона в кристалле под действием внешнего электрического поля. Заполнение энергетических зон электронами. Электропроводность твердых тел.

Состояние изолированного атома. Состояние электрона в изолированном атоме определяется четырьмя квантовыми числами: n , l , m , s (n – главное квантовое число, l – орбитальное, m – магнитное, s – спиновое квантовое число).

Если многоэлектронный атом не находится в магнитном поле и если не учитывать спин, то энергия электрона в атоме определяется заданием главного и орбитального квантовых чисел. Главное квантовое число определяет энергетический уровень электрона, а орбитальное – энергетические подуровни, обозначаемые s , p , d , f и т. д.

На первом энергетическом уровне ($n = 1$) (рис. 6.1) электроны могут находиться только в $1s$ -состоянии, и таких электронов только два; на втором энергетическом уровне ($n = 2$) два электрона в $2s$ -состоянии и шесть электронов в $2p$ -состоянии; на третьем энергетическом уровне ($n = 3$) два электрона в $3s$ -состоянии, шесть электронов в $3p$ -состоянии и десять электронов в $3d$ -состоянии и т. д.

При заданных n и l электрон может обладать различными значениями m и s ; m при заданном l может иметь $2l + 1$ значений, число s ограничено двумя значениями ($2s = \pm 1/2$). Поэтому имеется $2(2l + 1)$ состояний с одинаковыми n , l . В каждом состоянии, согласно принципу Паули, может находиться только один электрон. Во всех $2(2l + 1)$ состояниях энергия электронов одинакова. Состояния с одинаковой энергией называют **вырожденными состояниями**. Воздействие магнитного и электрического полей снимает вырождение, т. е. каждое из $2(2l + 1)$ состояний принимает вполне определенное значение энергии.

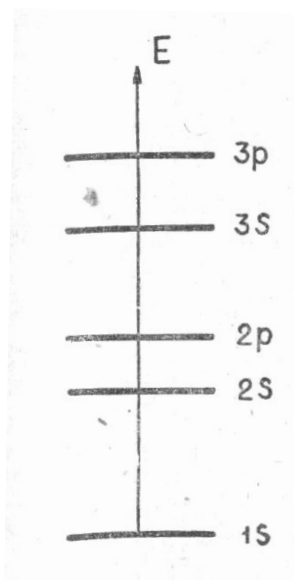


Рис. 6.1

Электрон, находящийся на последнем уровне, называют **валентным**. Валентный электрон под воздействием внешних причин может подняться на более высокий уровень – энергетический. Такой уровень называют **возбужденным**. Чем выше уровень, на который поднялся валентный электрон, тем меньше время пребывания атома в возбужденном состоянии – порядка 10^{-8} с.

В соответствии с принципом неопределенности ширина энергетического уровня возбужденных состояний

$$\Delta E = \frac{h}{\Delta t} = 10^{-7} \text{ эВ},$$

где Δt – время нахождения электрона в энергетическом состоянии от E до $E + dE$; h – постоянная Планка – определяет естественную ширину спектральных линий

$$\Delta \nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1}{\Delta t} = 10^8 \text{ с}^{-1}.$$

Электрон находится в потенциальной яме

$$V = -\frac{z \cdot e^2}{4 \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r}.$$

Если атом окружен другими атомами, то электроны способны переходить от одного атома к другому туннельным просачиванием сквозь потенциальный барьер, разделяющий атомы. Высота барьера для электронов, находящихся на различных уровнях, различна. Она равна разности энергий нулевого уровня и энергии уровня, на котором находится электрон. На рис. 6.2 показаны энергетические уровни и качественная картина распределения плотности вероятности нахождения электронов на данном расстоянии от ядра.

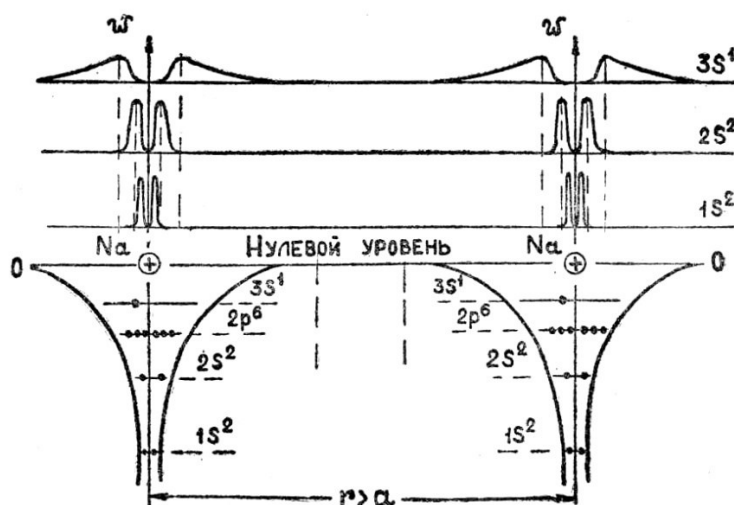


Рис. 6.2

Если ширина потенциальной ямы — a , а скорость электрона в атоме — v , то за одну секунду электрон в атоме подойдет к потенциальному барьеру $\frac{v}{a}$ раз.

Вероятность перехода электрона от одного атома к другому определяется выражением

$$w = \frac{v}{a} \cdot D_0 \cdot e^{-\frac{4\pi}{h} \cdot \sqrt{2m \cdot (U - E)} d}.$$

Среднее время жизни электрона в атоме

$$\tau = \frac{1}{w} = - \frac{e^{-\frac{4\pi}{h} \cdot \sqrt{2m \cdot (U - E)} d}}{\frac{v}{a} \cdot D_0}.$$

Величина τ существенно зависит от высоты $(U - E)$ и ширины d барьера. В изолированном атоме время жизни электрона в атоме исчисляется миллионами лет. Так, например, в атоме лития, полагая, что $U - E = 8 \cdot 10^{-19}$ Дж, $d = 30 \cdot 10^{-10}$ м, $a = 10^{-10}$ м, $v = 10^8$ м/с, время жизни $\tau = 10^7$ лет, т. е. один раз за 10^7 лет при данных условиях электрон перейдет от одного атома к другому. Отсюда следует, что на расстояниях $30 \cdot 10^{-10}$ м атомы не взаимодействуют и их можно считать изолированными друг от друга.

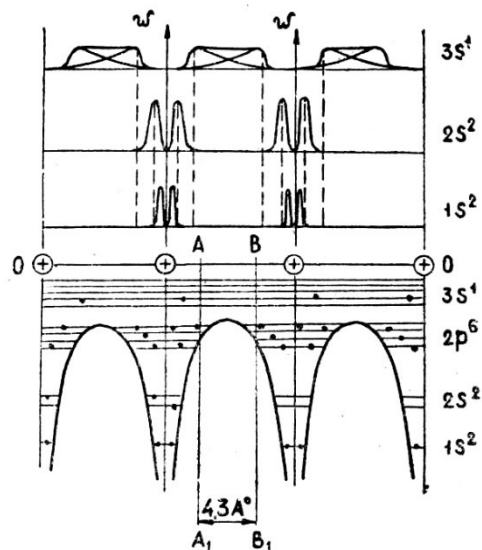


Рис. 6.3

Состояние атома в кристалле.

В кристаллах атомы находятся на расстояниях, равных периметру кристаллической решетки, т. е. на расстояниях порядка нескольких ангстрем (рис. 6.3). Потенциальные кривые, разграничивающие атомы, в этом случае частично накладываются друг на друга и дают результирующую кривую, проходящую ниже нулевого энергетического уровня, а иногда даже ниже уровня валентного электрона. Это означает, что сближение атомов вызывает уменьшение высоты и

ширины потенциального барьера. Просачивание электронов сквозь потенциальный барьер будет происходить чаще, а время жизни электрона в атоме будет меньше. Валентные электроны практически беспрепятственно могут переходить от одного атома к другому. Волновые функции валентных электронов перекрываются так, что дают электронное

облако равномерной плотности по всему кристаллу. Следовательно, вероятность обнаружения электронов в любом месте кристалла одинакова – валентные электроны полностью обобществлены. Обобществление (коллективизация) валентных электронов – следствие эквивалентности всех ионов решетки, и поэтому каждый электрон принадлежит одновременно всем атомам решетки и с равной вероятностью может быть обнаружен вблизи каждого из них.

Высота и ширина потенциального барьера для электронов, находящихся на внутренних уровнях, остаются достаточно большими, и электроны не могут свободно перемещаться по кристаллу.

Сближение атомов в кристаллах приводит и к взаимодействию магнитных и электрических полей атомов. Это воздействие снимает вырождение, т. е. каждое из $2(2l + 1)$ состояний атома принимает вполне определенное значение энергии.

Расщепление энергетических уровней. Одна из основных задач теории твердого тела – определение энергетического спектра обобществленных электронов в кристалле – в общем случае до сих пор не решена. Приближенные решения связаны с рядом упрощений.

1. Кристалл представляет собой сложную систему, состоящую из атомов и электронов. Атомы, находясь в узлах кристаллической решетки, совершают колебательные движения. Валентные электроны перемещаются между узлами решетки. Масса атома значительно больше массы электрона, а поэтому скорости атомов много меньше скоростей электронов. На основании этого при решении основной задачи делают первое упрощение: считают атомы кристалла покоящимися. Таким образом, задачу о движении системы ядер и электронов сводят к задаче о движении электронов в заданной решетке.

2. Сводят задачу о движении всех электронов к задаче о движении одного электрона. Для этого полагают, что электрон движется в некотором суммарном электрическом поле, созданном всеми ионами и всеми остальными электронами и не зависящем от мгновенного положения данного электрона. В этом случае движение электрона описывается уравнением Шрёдингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} = -\frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot [E - U(x, y, z)],$$

где $U(x, y, z)$ – потенциальная энергия электрона в поле ионов и остальных электронов.

Интегрирование этого уравнения представляет большие трудности. Как видно из рис. 6.3, результирующая потенциальная энергия электрона в зависимости от r имеет различный характер. Вблизи ядер (прямой AA_1 и правее прямой BB_1) результирующая потенциальная энергия близка по форме к потенциальной энергии изолированного атома. В области между ядрами (между прямыми AA_1 и BB_1) она близка к постоянной величине.

Потенциальную энергию вблизи ядер можно представить в виде

$$U(r) = U_a(r) + \delta U(r), \quad (6.1)$$

где $U_a(r)$ – потенциальная энергия электрона изолированного атома; $\delta U(r)$ – поправочный член, учитывающий степень отклонения от постоянной величины; причем $\delta U(r) \ll U_a(r)$. Потенциальную энергию в области между ядрами можно представить в виде

$$U(r) = U_0(r) + \delta U(r),$$

где $U_0(r)$ – постоянная величина; $\delta U(r)$ – поправочный член, учитывающий степень отклонения от постоянной величины; причем $\delta U(r) \ll U_0(r)$.

Приближение сильносвязанных электронов. Рассмотрим состояние электронов, находящихся вблизи ядер. Для описания таких электронов в уравнение Шрёдингера следует подставить потенциальную энергию вида выражения (6.1).

Если в уравнении потенциальной энергии (6.1) пренебречь членом $\delta U(r)$, то волновые функции и энергии электронов, находящихся вблизи ядер, будут соответствовать волновым функциям и энергиям изолированного атома.

Влияние $\delta U(r)$ сводится к уменьшению высоты и ширины потенциального барьера. Вследствие этого просачивание электронов сквозь потенциальный барьер будет чаще, а среднее время жизни электрона в атоме – меньше. Так, например, при $U - E = 8 \cdot 10^{-19}$ Дж, $d = 30 \cdot 10^{-10}$ м, $a = 10^{-10}$ м, $v = 10^8$ м/с частота просачивания электрона через барьер равна $w = 10^{15}$ 1/с, а среднее время жизни $\tau = 10^{-15}$ с. При столь малом времени просачивания электрона в атоме нельзя считать его принадлежащим к какому-либо отдельному атому. Такой электрон свободно перемещается по кристаллу. Электроны образуют электронный газ.

Однако не все электроны атома обобществляются. Из рис. 6.3 видно, что волновые функции электронов, обладающих разной энер-

гией в объеме кристалла, распределены по-разному. Волновые функции внутренних электронов отличны от нуля только вблизи ядер. Для этих электронов вследствие высоких потенциальных барьеров и относительно больших расстояний от соседних атомов вероятность туннельного перехода очень мала, а среднее время жизни электронов в этих состояниях очень велико. Поэтому внутренние электроны атомов кристалла практически не меняют своих состояний.

В соответствии с принципом неопределенности неопределенность в энергии электрона в кристалле равна

$$\Delta E = \frac{h}{\tau} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-15}} = 6,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 4 \text{ эВ}.$$

Энергетический уровень изолированного атома, имеющий естественную ширину 10^{-7} эВ, расширился до нескольких электронвольт, образуя энергетическую зону. Чем ниже энергетический уровень электрона в атоме, тем больше время жизни, а следовательно, уже ширина энергетической зоны (рис. 6.4).

В кристалле каждый атом попадает в электромагнитное поле соседних атомов, с которыми он взаимодействует. Это взаимодействие приводит, как уже отмечалось, к расширению энергетических уровней (к образованию энергетических зон) и снятию вырождения, т. е. энергия каждого электрона в атоме отлична от энергии других электронов.

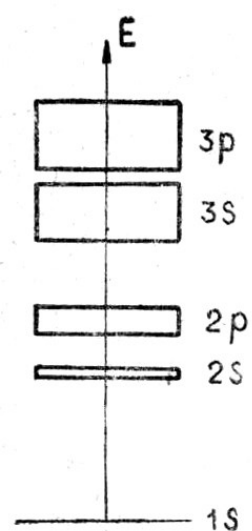


Рис. 6.4

В системе, состоящей из N атомов, электрон с данной энергией может находиться в любом из атомов. Следовательно, каждая энергетическая зона, образовавшаяся из невырожденного атомного уровня, оказывается состоящей из N близко расположенных друг к другу подуровней. Если энергетический уровень в атоме имеет $(2l + 1)$ кратное вырождение, то соответствующая ему энергетическая зона будет состоять из $(2l + 1) N$ подуровней. Так, трехкратно вырожденный уровень p даст зону, состоящую из $3N$ подуровней, пятикратный вырожденный уровень – d -зону, состоящую из $5N$ подуровней. На каждом подуровне могут находиться два электрона с различными спинами.

В кристалле размером 1 см^3 содержится примерно 10^{22} атомов. При ширине зоны 4 эВ подуровни в зоне отличаются друг от друга на величину $4 \cdot 10^{-22}$ эВ. Эта величина столь мала, что можно считать, что в зонах энергия электронов имеет непрерывный энергетический спектр.

Проиллюстрируем это на рис. 6.5. На нем изображен ряд из пяти атомов водорода, расположенных на одной прямой, на одинаковом

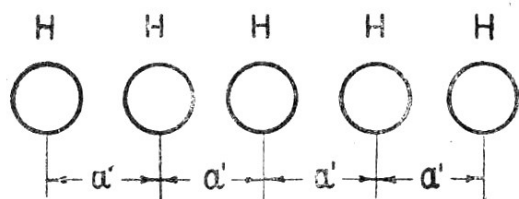


Рис. 6.5

расстоянии друг от друга, совершенно не взаимодействующих между собой. Будем сближать атомы так, чтобы расстояния между ними оставались равными. При сближении возрастает их взаимодействие.

На рис. 6.6 по вертикальной оси отложена энергия электрона, а по горизонтальной – расстояние между атомами. Показаны два первых состояния атома водорода. При достаточно большом расстоянии между атомами диаграмма уровней будет такая же, как и для изолированного атома. Когда же между атомами расстояние уменьшается, начи-

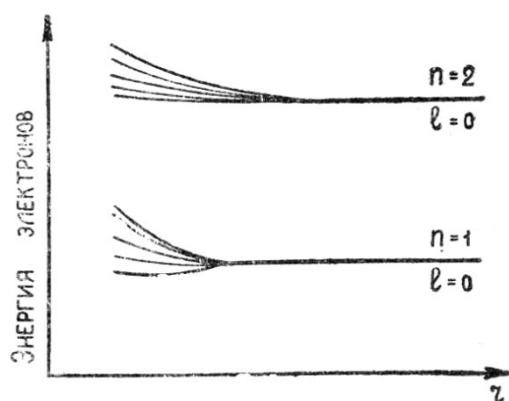


Рис. 6.6

нается взаимодействие атомов и резкий энергетический уровень изолированного атома расплывается в энергетическую зону. По мере сближения атомов ширина зоны увеличивается, так как уменьшается время жизни электрона в атоме. Энергия каждого из пяти электронов лежит в интервале энергетической зоны, но в соответ-

ствии с принципом Паули энергии электронов должны иметь отличные друг от друга значения. Поэтому в зоне образуется пять (по числу атомов) подуровней.

На рис. 6.4 и 6.6 видно, что энергетические зоны отделены друг от друга зонами запрещенных энергий. Ширина этих зон измеряется также в электронвольтах. Для перехода из нижней зоны в ближайшую верхнюю зону электрон должен обладать энергией, достаточной для преодоления запрещенной зоны. Эту энергию называют **энергией активации**.

При ширине запрещенной зоны 1 эВ энергия активации равна энергии теплового движения, соответствующего температуре

$$T = \frac{2\Delta E h}{3k} = 1,1 \cdot 10^4 \text{ К.}$$

Таким образом, изменение энергии электрона, соответствующей переходу его из одной разрешенной энергетической зоны в другую, при обычных температурах невозможно.

Рассмотрим приближение свободных электронов. Потенциальную энергию электронов в кристалле считают величиной постоянной и меньшей нуля, т. е. электроны находятся в потенциальной яме, размеры которой равны геометрическим размерам кристалла.

Рассмотрим движение электрона в направлении оси OX . Для этого проинтегрируем уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E \cdot u(x) = 0$$

или

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k^2 \cdot u(x) = 0, \quad (6.2)$$

где $k^2 = \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot E$. Проинтегрировав уравнение, получим

$$u(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}.$$

Волновая функция u должна удовлетворять граничным условиям, т. е. при $x = 0$ и при $x = L$ волновая функция равна нулю (электроны не выходят за пределы кристалла). Отсюда найдем

$$A = -B, \quad k = \frac{\pi}{L} h.$$

Таким образом, волновые функции электрона в этом приближении представляют собой совокупность волн де Бройля, бегущих налево и направо. Волновые числа определяются согласно формуле (6.2).

Зависимость энергии электрона от волнового числа параболическая. Минимальное значение энергии наблюдается при $k = 0$. Приближение свободных электронов к реальной картине твердого тела очень грубое: оно не учитывает строение твердого тела, заменяя реальные взаимодействия электронов с узлами решетки идеальным полем с постоянным потенциалом.

Рассмотрим приближение слабосвязанных электронов. Функция $u(r)$ – периодическая; с периодом, равным периоду решетки. Модель кристалла в этом приближении можно представить как трехмерную потенциальную яму с рифленным дном. Решение уравнения Шрёдингера

для модели одномерного кристалла (рис. 6.7) будем искать из следующих соображений. Поскольку электроны могут легко перемещаться по кристаллу, решение должно содержать член, указывающий на свободное движение электронов. Таким членом является уравнение плоской бегущей волны e^{ikr} . С другой стороны, решение должно отражать периодичность воздействия атомов на электроны. Этим членом будет некоторая функция $f(r)$. Общее решение уравнения Шрёдингера можно представить как

$$u(r) = f(r) \cdot e^{ikr}.$$

Это уравнение выражает общий вид волновой функции электрона, находящегося в периодическом поле кристалла; $u(r)$ представляет собой уравнение плоской волны, амплитуда которой $f(r)$. Конкретный вид этой функции определяется потенциальной энергией $U(r)$. Рассмотрим движение электрона в кристалле (см. рис. 6.7). Эта модель представляет собой линейную цепочку прямоугольных ям, ширина которых равна a . Ямы отделены друг от друга потенциальными барьерами толщиной b и u_0 (модель Кронига – Пенни); длина цепочки равна L , постоянная решетки $d = a + b$.

Для этой модели кристалла волновая функция зависит только от одной координаты, и уравнение примет вид

$$u(x) = f(x) \cdot e^{ikr}.$$

Подставив его в уравнение Шрёдингера, получим дифференциальное уравнение для функции $f(x)$

$$\frac{d^2x}{dx^2} + \frac{8 \cdot \pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (E - U).$$

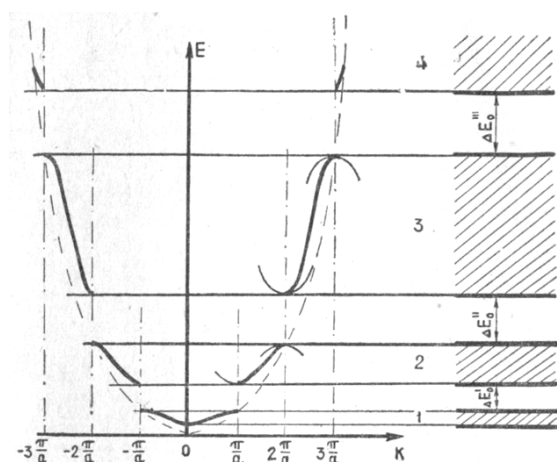


Рис. 6.8

Решение этого уравнения определяет области разрешенных энергий электрона в кристалле – энергетические зоны. Эти зоны отделены полосами запрещенных энергий – запрещенными энергетическими зонами. Из графика зависимости (рис. 6.8) энергии электрона от волнового числа k (пунктирной линией показана зависимость энергии свободного электрона от k) видно, что

внутри каждой разрешенной зоны энергия электрона непрерывно растет с ростом волнового числа. При значениях

$$k = \frac{\pi}{a} \cdot n \quad (n = \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots)$$

энергия претерпевает разрыв, приводящий к образованию запрещенных зон. Если k выразить через длину волны, то это равенство примет следующий вид:

$$\pi \cdot n = 2a. \quad (6.3)$$

Это известная формула Вульфа – Брэгга, выражающая условие отражения волн от плоскостей решетки для случая, когда угол падения равен 90° . Следовательно, разрывы в энергетическом спектре электрона в кристалле происходят при выполнении условия брэгговского отражения электронных волн от плоскостей решетки. Электроны с такой длиной волны претерпевают полное внутреннее отражение и распространяться в кристалле не могут. Можно показать, что на границах зон производная

$$\frac{dE(k)}{dk} = 0,$$

а энергия $E(k)$ вблизи границ зон – квадратичная функция волнового числа, отсчитанного от этих границ,

$$E(k) = E_0 + A \cdot k^2;$$

где E_0 – энергия, соответствующая границе зоны. Поскольку внутри зоны функция $E(k)$ монотонно возрастающая, условие (6.3) означает, что у границ зон располагаются экстремумы этой функции. На рис. 6.8 тонкими линиями показаны параболы, соответствующие уравнению. У дна зон параболы нормальные, что соответствует неравенству $A > 0$; у потолка зон – обращенные, что соответствует неравенству $A < 0$.

Таким образом, электрон, находящийся в кристалле, может иметь энергию только в строго определенных интервалах – зонах. С увеличением волнового числа увеличивается ширина разрешенных зон и уменьшается ширина запрещенных зон.

Движение электрона в кристалле под действием внешнего электрического поля. Пусть кристалл помещен в электрическое поле \vec{E} . Тогда на электрон, находящийся в кристалле, будет действовать электрическая сила $e \cdot \vec{E}$. Под действием этой силы электрон начнет перемещаться по кристаллу в направлении действия силы. По мере перемещения электрон будет переходить от одного атома к другому, каждый из которых будет оказывать на него воздействие. Движение электрона,

следовательно, надо рассматривать как движение под действием и внутренних, и внешних сил. Внешняя сила F за время dt изменяет энергию электрона на величину

$$dw = F \cdot v \cdot dv,$$

где v – скорость электрона, равная групповой скорости волн де Бройля

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{2\pi}{h} \cdot \frac{dw}{dk}.$$

$$\text{Поскольку для электронных волн } w = 2\pi \cdot v = \frac{2\pi w}{h},$$

то из предыдущего выражения найдем

$$dw = \frac{h}{2\pi} \cdot v \cdot dk.$$

Из этих уравнений получим

$$\frac{dk}{dt} = \frac{2\pi}{h} \cdot F.$$

Продифференцировав групповую скорость волн де Бройля по t , получим

$$\frac{dv}{dt} = \frac{d^2 w}{dk^2} \cdot \frac{4\pi^2}{h^2} F.$$

Эта формула устанавливает связь между ускорением электрона и действующей внешней силой F . Для свободной частицы эта связь имеет вид $\frac{dv}{dt} = \frac{F}{m}$ (второй закон Ньютона).

Таким образом, движение электронов в кристалле можно рассматривать как движение свободной частицы с массой

$$m^x = \frac{h^2}{4\pi^2} \left(\frac{d^2 w}{dk^2} \right)^{-1}$$

под действием только одной внешней силы. Массу m^x называют **эффективной массой электрона**.

Для нахождения эффективной массы электрона необходимо знать зависимость энергии электрона E от волнового числа k . Так, например, для свободного электрона при $E = \frac{h^2}{8\pi^2 m} k^2$ получим, что $m^x = m$, т. е. равна массе свободного электрона.

В кристалле энергия электронов вблизи границ зон $E = E_0 + A \times k^2 = 2$, откуда эффективная масса $m^x = \frac{h^2}{8\pi^2 A}$. У дна зон $A > 0$, следо-

вательно, эффективная масса электрона отрицательна. По величине эффективная масса электрона может быть как больше, так и меньше массы электрона. Например, для палладия $\frac{m^X}{m} = 43$, для германия $\frac{m^X}{m} = 12$.

При движении частиц в кристалле под действием электрической силы энергия электрона может меняться от значений, соответствующих энергии дна зоны, до энергий, соответствующих верхнему краю зоны. При этом эффективная масса электрона меняется не только по величине, но и по знаку. Таких электронов в природе не существует. При движении истинного электрона в кристалле его масса не изменяется. Введение понятия эффективной массы электрона лишь удобный способ описания движения электрона, находящегося в кристалле, под действием внешней электрической силы.

Таким образом, движение электрона заменили движением свободной квазичастицы с массой, не равной массе электрона. Эффективная масса не является массой в обычном смысле слова. Она не определяет ни запаса энергии, ни инерционных, ни гравитационных свойств электрона. Эффективная масса лишь коэффициент пропорциональности в соотношении, связывающем силу с ускорением частицы.

Заполнение энергетических зон электронами. В кристалле энергия электронов может принимать значения, лежащие внутри разрешенных зон. В каждой энергетической зоне имеется вполне определенное число возможных состояний, равное $(2l + 1)N$, где l – квантовое число, определяющее номер подболочки атома; N – число атомов. По принципу Паули в каждом состоянии могут находиться только два электрона с разными спинами. Следовательно, в каждой зоне может быть $2(2l + 1)N$ электронов; в $1s$ -зоне ($l = 0$) – $2N$ электронов; в p -зоне ($l = 1$) – $6N$ электронов.

По характеру заполнения зон электронами все тела делят на две большие группы. К первой группе относят тела, у которых над целиком заполненными зонами располагается зона, заполненная частично, – зона проводимости. Все металлы имеют частично заполненную зону. Так, например, в атоме лития оба состояния $1s$ заняты; $1s$ -зона в кристалле лития полностью заполнена – в ней находится $2N$ электронов.

Состояние $2s$ в атоме лития занято только одним электроном; $2s$ -зона в кристалле лития заполнена наполовину и имеет N электронов.

У атома натрия электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Зоны $1s, 2s, 2p$ полностью заполнены, т. е. состояния $1s, 2s, 2p$ в атоме натрия полностью заняты. Зона $3s$ заполнена наполовину, так как в состоянии $3s$ в атоме натрия имеется только один электрон.

У двухатомного бериллия электронная конфигурация $1s^2 2s^2$. Зона $1s$ полностью заполнена; зона $2s$ также заполнена, так как оба состояния $2s$ в атоме бериллия на уровне заняты. В атоме бериллия на уровне $2p$ вообще нет электронов. Казалось бы, что в кристалле бериллия имеются две полностью заполненные зоны. Но это не так. В кристалле бериллия зона $2p$ настолько широка, что она перекрывает зону $2s$. Объединенная зона имеет $2N + 6N = 8N$ возможных состояний, а электронов в ней только $2N$.

Анализ расположения зон в твердых телах показывает, что атомы с одним, двумя и тремя валентными электронами образуют тела с частично заполненными зонами.

Ко второй группе относятся тела, у которых над целиком заполненными валентными зонами располагаются пустые зоны проводимости. Типичный пример твердых тел с таким характером заполнения зон – элементы четвертой группы таблицы Менделеева (алмаз, кремний, германий).

К этой группе твердых тел относятся и многие химические соединения. В качестве примера рассмотрим структуру зон у NaCl. Электронные конфигурации Na и Cl соответственно $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ и $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$. На рис. 6.9 показаны зоны кристалла NaCl, получающиеся при расщеплении уровня $3s$ натрия и $3p$ хлора. Нижние зоны не представляют ин-

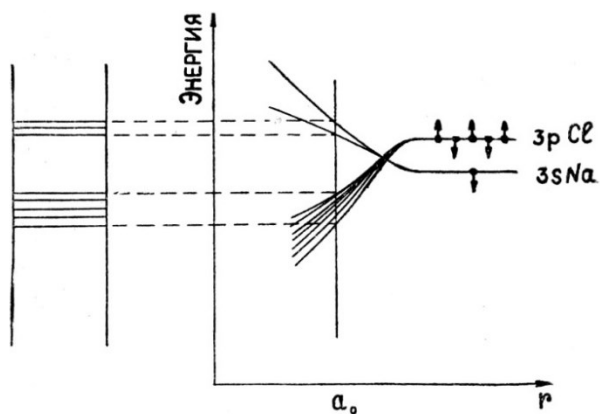


Рис. 6.9

тереса, так как они заполнены полностью. Образованию кристалла предшествует образование ионов Na^+ и Cl^- . При этом энергия $3s$ -уровня натрия повышается (сообщается энергия на отрыв электрона), а энергия $3p$ -уровня хлора понижается (выделяется энергия при присоединении электрона). Поэтому уровни $3s$ и $3p$ пересекаются и электроны уходят из зоны $3s$ натрия в зону $3p$ хлора, где есть свободные

состояния. Зона $3p$ хлора оказывается полностью заполненной, а зона $3s$ натрия – совсем пустой.

Твердые тела, у которых зоны проводимости пустые, являются либо изоляторами, либо полупроводниками.

Согласно зонной теории твердых тел электроны валентных энергетических зон имеют практически одинаковую свободу движения во всех телах независимо от того, относятся ли они к первой группе или ко второй.

В отсутствие внешнего поля это движение не может, однако, привести к образованию электрического тока, так как распределение электронов по скоростям симметричное. Это означает, что если в кристалле выбрать электрон, движущийся с данной скоростью в данном направлении, то обязательно найдется другой электрон, имеющий такую же скорость, но движущийся в противоположном направлении.

Электропроводность твердых тел. Создадим в кристалле электрическое поле напряженностью \vec{E} , которое на каждый электрон будет действовать с силой $\vec{F} = -e \cdot \vec{E}$. Под действием этой силы электроны, движущиеся по направлению электрического поля, будут уменьшать свою скорость; а электроны, движущиеся в противоположном направлении, будут увеличивать скорость, вследствие чего энергия электронов изменится. Всякое изменение энергии неизбежно изменяет состояние электрона.

В зонах, полностью заполненных электронами, электрическое поле не в состоянии изменить характер движения электронов, так как зоны не содержат ни одного свободного уровня. Электрическое поле может вызвать лишь перестановку электронов местами, что не нарушает симметрии распределения их по скоростям. На самом деле, мгновенный ток, созданный одним электроном, движущимся со скоростью v_k , равен $I = -e \cdot v_k$. Результирующий мгновенный ток для всей совокупности электронов в зоне $I = -\sum_k e \cdot v_k$. Суммирование ведется по всем состояниям, занятым электронами. В зоне, полностью занятой электронами, для любого электрона со скоростью v_k найдется другой электрон со скоростью $-v_k$. Поэтому $\sum_k v_k = 0$ и $I = 0$. В кристаллах, энергетические уровни которых заполнены полностью, электрическое

поле не может вызвать упорядоченного движения электронов (электрический ток), способных двигаться по всему телу несмотря на наличие свободных электронов. Такие кристаллы являются диэлектриками.

В зонах, частично заполненных электронами, имеются незанятые квантовые состояния. Поэтому электроны под действием электрического поля могут изменять свои состояния, нарушая симметрию распределения электронов по скоростям. Число электронов, движущихся в направлении поля, уменьшается; а число электронов, движущихся в противоположном направлении, увеличивается. Таким образом, в кристалле создается упорядоченное движение электронов – электрический ток. Кристаллы, в которых имеются частично заполненные зоны, являются проводниками электрического тока. Все металлы – проводники.

Среди диэлектриков есть такие, у которых ширина запрещенной зоны очень мала ($\Delta E < 1$ эВ). В этом случае при комнатной температуре энергии теплового движения электрона достаточно, чтобы он перешел из валентной зоны в свободную (зону проводимости). Свободная зона становится частично заполненной, и кристалл в этом состоянии способен проводить электрический ток. Кристаллы, обладающие таким свойством, получили название **полупроводников**. Типичные полупроводники – кремний и германий.

Собственная проводимость полупроводников. Допустим, что из валентной зоны полупроводников выбыл один электрон, скорость которого v_k . Зона проводимости приобрела свободный электрон. В валентной зоне появилось одно свободное состояние. Электроны валентной зоны теперь могут изменять свою энергию (переходить в свободное состояние) и под действием внешнего электрического поля создавать электрический ток. Мгновенный ток, образованный всеми электронами валентной зоны, $I = -\sum_{i=k} e \cdot v_i = -\sum_i e \cdot v_i + e \cdot v_k$. Первое слагаемое $-e \cdot v_i$ – равно нулю; а ток, образованный всеми электронами валентной зоны, равен току, который создается движением одной положительно заряженной фиктивной частицы, движущейся со скоростью v_k , т. е. со скоростью, с которой двигался электрон, покинувший валентную зону. Что это за частица? Рассмотрим движение электрона, энергия которого соответствует потолку энергетической зоны. Как известно, эффективная масса такого электрона отрицательна. Под действием внешней электрической силы $\vec{F} = -e \cdot \vec{E}$ электрон придет в движение в направлении, противоположном действию силы, так как

$F = m^X \cdot a$, т. е. движение электрона можно заменить движением фиктивной положительно заряженной частицы с массой, равной эффективной массе электрона.

Движением фиктивной частицы и заменяется движение всех электронов валентной зоны, создающих электрический ток. Эту фиктивную частицу называют **дыркой**. Фиктивной ее называют потому, что она в действительности не существует. Введение понятия «дырка» оправдано тем, что движение огромного числа электронов валентной зоны по свободным уровням заменяется движением небольшого числа дырок, располагающихся на этих уровнях. Проводимость, обусловленная движением дырок, получила название **дырочной**; проводимость, обусловленную движением свободных электронов (в зоне проводимости), называют **электронной проводимостью**.

Тестовые вопросы и задачи

Задание 1. Какими квантовыми числами определяется состояние электрона в атоме? Дайте им пояснения.

Задание 2. Какой уровень называют валентным?

Задание 3. Дайте определение расщепления энергетических уровней.

Задание 4. Чем отличается валентная зона от зоны проводимости?

Задание 5. Что такое эффективная масса электрона? Дайте пояснение.

Задание 6. По какому принципу происходит заполнение энергетических зон электронами?

Задание 7. Дайте классификацию электропроводности твердых тел.

Задание 8. Поясните собственную проводимость полупроводников.

Задание 9. Какую частицу называют дыркой?

Задание 10. Что называют электронной проводимостью?

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Учебно-практическое пособие составлено в соответствии с программой курса общей физики для студентов технических направлений подготовки высших учебных заведений. Физика – фундаментальная наука, которая относится к естественнонаучному профилю и определяет практическую сторону жизни человека. Знание особенностей поведения частиц микромира позволяет комфортнее себя чувствовать в определении работы современных устройств, например, современной вычислительной техники, связи и различной оптической техники.

Для усвоения полученных знаний в каждом разделе пособия приведены контрольные вопросы и задачи тестового типа. Кроме этого в приложении представлены некоторые справочные сведения, которые могут быть использованы при решении конкретных задач атомной физики.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Детлаф, А. А.* Курс физики / А. А. Детлаф, Б. М. Яворский. – М. : Высш. шк., 1987. – 607 с. – ISBN 978-5-8114-0630-2.
2. *Трофимова, Т. И.* Курс физики / Т. И. Трофимова. – М. : Высш. шк., 1990. – 470 с. – ISBN 5-06-001540-8.
3. *Ан, А. Ф.* Основы современной физики : учеб. пособие / А. Ф. Ан, А. В. Самохин. – Муром : Изд.-полигр. центр МИ ВлГУ, 2008. – 165 с. – ISBN 978-5-8439-0149-3.
4. *Волькенштейн, В. С.* Сборник задач по общему курсу физики / В. С. Волькенштейн. – М. : Наука, 1979. – 351 с.
5. *Мухин, К. Н.* Экспериментальная ядерная физика : учеб. для вузов. В 2 т. Т. 1. Физика атомного ядра / К. Н. Мухин. – 4-е изд., перераб. и доп. – М. : Энергоатомиздат, 1983. – 616 с.
6. *Галкин, А. Ф.* Лекции по физике. Квантовая и ядерная физика / А. Ф. Галкин, Н. С. Прокошева ; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2016. – 87 с. – ISBN 978-5-9984-0654-6.
7. Физика : метод. указания к инновац. лаб. работам на базе лазер. установки «Интерферометр Майкельсона» и платформы NI ELVIS / Владим. гос. ун-т ; сост.: А. Ф. Галкин [и др.]. – Владимир : Изд-во Владим. гос. ун-та, 2011. – 52 с.
8. *Фуров, Л. В.* Учебное пособие к практическим работам по физике / авт.-сост. Л. В. Фуров ; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2019. – 140 с. – ISBN 978-5-9984-1030-7.
9. Методические указания, программа, вопросы и задачи по физике / Владим. гос. ун-т ; сост.: В. Н. Кунин, А. Ф. Галкин. – Владимир : Изд-во Владим. гос. ун-та, 2007. – 124 с.
10. *Фуров, Л. В.* Основы технической физики: теория, задачи, тесты : учеб.-практ. пособие / авт.-сост. Л. В. Фуров ; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2021. – 208 с. – ISBN 978-5-9984-1409-1.

11. *Савельев, И. В.* Курс общей физики : учебник. В 3 т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И. В. Савельев. – 12-е изд., стер. – СПб. : Лань, 2017. – 306 с. – ISBN 978-5-8114-0630-2.

12. *Савельев, И. В.* Сборник вопросов и задач по общей физике / И. В. Савельев. – М. : Наука, 1982. – 271 с.

13. Сборник качественных вопросов и задач по общей физике : учеб. пособие для втузов / Е. И. Бабаджан [и др.]. – М. : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. – 400 с. – ISBN 5-02-014473-8.

14. Учебное пособие для самостоятельной работы по физике / авт.-сост.: А. А. Кулиш, Л. В. Фуров ; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2017. – 128 с. – ISBN 978-5-9984-0822-9.

15. Физика : метод. указания для подгот. к интернет-экзамену (тестовые задания) / Владим. гос. ун-т ; сост.: А. Ф. Галкин, В. В. Дорожков ; под ред. А. Ф. Галкина. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2011. – 38 с.

16. Физика : метод. указания и контрол. задания для студентов-заочников инженер.-техн. специальностей вузов / под ред. А. Г. Чертова. – М. : Высш. шк., 1987. – 208 с.

17. Физика : метод. указания для подгот. студентов к тестированию / Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых ; сост. : А. Ф. Галкин [и др.]. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2013. – 244 с.

18. *Радциг, А. А.* Параметры атомов и атомных ионов : справочник / А. А. Радциг, Б. М. Смирнов. – 2-е изд., перераб. и доп. – М. : Энергоатомиздат, 1986. – 344 с.

19. *Чертов, А. Г.* Задачник по физике / А. Г. Чертов, А. А. Воробьев. – М. : Высш. шк., 1988. – 527 с. – ISBN 5-06-0011183-6.

Интернет-ресурсы

1. Электронная библиотека ВлГУ [Электронный ресурс]. – URL: <http://e.lib.vlsu.ru/> (дата обращения: 14.10.2025).
2. Консультант студента [Электронный ресурс]. – URL: www.studentlibrary.ru (дата обращения: 14.10.2025).
3. Библиотех [Электронный ресурс]. – URL: <https://vlsu.bibliotech.ru> (дата обращения: 14.10. 2025).
4. ЛАНЬ [Электронный ресурс] : электрон.-библ. система. – URL: <http://e.lanbook.com/> (дата обращения: 14.10. 2025).
5. IPRbooks [Электронный ресурс]: электрон.-библ. система. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/> (дата обращения: 14.10.2025).

ПРИЛОЖЕНИЕ

1. Основные константы и единицы

Физическая постоянная	Обозначение	Значение
Скорость света в вакууме	c	$299\,792\,458\text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$
Заряд электрона абсолютная величина	e	$1,602\,177\,33 \cdot 10^{-19}\text{ Кл}$
Масса покоя электрона	m_e	$9,109\,389\,7 \cdot 10^{-31}\text{ кг} =$ $= 0,511\text{ МэВ}$
Масса покоя протона	m_p	$1838,6\, m_e = 1,008665$ $\text{а.е.м} = 939,55\text{ МэВ}$
Масса нейтрона	m_n	$1836,1\, m_e = 1,007276$ $\text{а.е.м} = 938,26\text{ МэВ}$
Классический радиус электрона	$r_e = e^2 / m_e c$	$2,8 \cdot 10^{-15}\text{ м}$
Постоянная Планка	h \hbar	$6,63 \cdot 10^{-34}\text{ Дж} \cdot \text{с}$ $1,05 \cdot 10^{-34}\text{ Дж} \cdot \text{с}$
Комптоновская длина волны электрона	$\lambda_e^{\text{комнт}} = \hbar / m_e \cdot c$	$3,85 \cdot 10^{-13}\text{ см}$
Комптоновская длина волны π -мезона	$\lambda_\pi^{\text{комнт}} = \hbar / m_\pi \cdot c$	$3,4 \cdot 10^{-13}\text{ см}$
Комптоновская длина волны нуклона	$\lambda_N^{\text{комнт}} = \hbar / m_N \cdot c$	$0,2 \cdot 10^{-13}\text{ см}$
Гравитационная постоянная	G	$6,67 \cdot 10^{-11}\text{ кг}^{-1} \cdot \text{м}^3 \cdot \text{с}^{-2}$
Ядерное время	$\tau_{\text{яд}} = a / c$, где a – радиус действия сил	$1,4 \cdot 10^{-13} / 3 \cdot 10^{10} \approx$ $\approx 0,5 \cdot 10^{-13}\text{ с}$
Константа слабого взаимодействия	g	$1,4 \cdot 10^{-49}\text{ эрг} \cdot \text{см}^3$
Число Авогадро	N_A	$6,022 \cdot 10^{23}\text{ моль}^{-1}$
Молярная газовая постоянная	R	$8,31\text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$
Радиус атома	$R_{\text{ат}}$	$0,5 \cdot 10^{-10}\text{ м}$
Радиус ядра	$R_{\text{яд}}$	$(2 \div 8) \cdot 10^{-15}\text{ м}$
Постоянная Больцмана	$k = R / N_A$	$1,38 \cdot 10^{-23}\text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1}$
Постоянная Фарадея	$F = N_A e$	$9,65 \cdot 10^7\text{ Кл} \cdot \text{моль}^{-1}$
Электрическая постоянная	$\epsilon_0 = (\mu_0 c^2)^{-1} =$ $= (4\pi c^2)^{-1} \cdot 10^7\text{ Ф} \cdot \text{м}^{-1}$	$8,85 \cdot 10^{-12}\text{ Ф} \cdot \text{м}^{-1}$
Магнитная постоянная	$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}\text{ Гн} \cdot \text{м}^{-1}$	$1,26 \cdot 10^{-6}\text{ Гн} \cdot \text{м}^{-1}$
Магнетон Бора	M_B	$0,927 \cdot 10^{-23}\text{ А} \cdot \text{м}^2$

Окончание

Физическая постоянная	Обозначение	Значение
Ядерный магнетон Бора	$\mu_B = \frac{e}{m_e} \cdot \frac{\hbar}{2} = \frac{M_B}{1836}$	$5,05 \cdot 10^{-24}$ эрг · Гс
Магнитный момент протона	$M_p = 2,78 \mu_B$	—
Магнитный момент нейтрона	$\mu_n \approx -1,91 \mu_B$	—
Магнитный момент электрона	$M_e \approx 1 M_B$	
Масса покоя α -частицы	m_α	$6,64 \cdot 10^{-27}$ кг
Постоянная Стефана – Больцмана	σ	$5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт · м ⁻² · К ⁻⁴
Постоянная закона смещения Вина	b	$2,90 \cdot 10^{-3}$ м · К
Энергия теплового нейтрона	$T_{\text{тепл}} = k T^0$	1/40 эВ
Постоянная Ридберга	R	$1,10 \cdot 10^7$ м ⁻¹
Радиус Бора	a	$0,529 \cdot 10^{-10}$ м
Средняя энергия связи ядра на один кулон	$\bar{\varepsilon} = \Delta \bar{W} / \bar{A}$	≈ 8 МэВ
Средняя энергия деления одного тяжелого ядра	\bar{Q}	≈ 200 МэВ
Энергия ионизации атома водорода	E_i	$2,18 \cdot 10^{-18}$ Дж (13,6 эВ)

2. Единицы некоторых физических величин

Физическая величина	Значение
Ангстрем	$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м} = 10^{-8} \text{ см}$
Фемтометр	$1 \text{ фм} = 10^{-15} \text{ м}$
Радан	$1 \text{ рад} = 57^\circ 17' 44,8'' = 57,3^\circ$
Атмосфера	$1 \text{ атм} = 1,0133 \cdot 10^5 \text{ Па}$
Миллиметр ртутного столба	$1 \text{ мм рт. ст.} = 1,3332 \cdot 10^5 \text{ Па}$
Электронвольт	$1 \text{ эВ} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$
Активность нуклида в радиоактивном источнике (активность изотопа)	$1 \text{ Ки} = 3,700 \cdot 10^{10} \text{ Бк (расп./с)}$
Атомная единица массы	$1 \text{ а.е.м.} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ эрг} = 931,5 \text{ МэВ}$

3. Основные единицы СИ и их связь с внесистемными единицами

Длина

Метр (м, m) представляет собой расстояние, проходимое в вакууме плоской электромагнитной волной за $1 / 299\,792\,458$ долю секунды:

1 а.е. (астрономическая единица) = $1,49598 \cdot 10^{11}$ м;

1 св. год (световой год) = $9,4605 \cdot 10^{15}$ м;

1 пк (парсек) = $3,0857 \cdot 10^{16}$ м.

Масса

Килограмм (кг, kg) равен массе международного прототипа килограмма:

1 т (тонна) = 103 кг;

1 а.е.м. (атомная единица массы) = $1,6605655 \cdot 10^{-27}$ кг.

Время

Секунда (с, s) равна $9\,192\,631\,770$ периодов излучения, соответствующего переходу между двумя сверхтонкими уровнями основного состояния атома цезия-133:

1 мин (минута) = 60 с;

1 ч (час) = 3600 с;

1 сут (сутки) = 86 400 с.

Сила электрического тока

Ампер (А, A) равен силе неизменяющегося тока, который при прохождении по двум параллельным прямолинейным проводникам бесконечной длины и ничтожно малой площади кругового поперечного сечения, расположенным в вакууме на расстоянии 1 м один от другого, вызвал бы на каждом участке проводника длиной 1 м силу взаимодействия, равную $2 \cdot 10^{-7}$ Н.

Термодинамическая температура

Кельвин (К, K) равен $1 / 273,16$ части термодинамической температуры тройной точки воды.

Количество вещества

Моль (моль, mol) равен количеству вещества системы, содержащей столько же структурных элементов, сколько содержится атомов в углероде-12 массой 0,012 кг.

Сила света

Кандела (кд, cd) равна силе света в заданном направлении источника, испускающего монохроматическое излучение частотой $540 \cdot 10^{12}$ Гц, энергетическая сила света которого в этом направлении составляет $(1/683)$ Вт/ср.

4. Дополнительные единицы

Плоский угол

Радиян (рад, rad) равен углу между двумя радиусами окружности, длина дуги между которыми равна радиусу:

1° (угл. градус) = $(\pi/180)$ рад;

$1'$ (угл. минута) = $(\pi/10\,800)$ рад;

$1''$ (угл. секунда) = $(\pi/648\,000)$ рад.

Телесный угол

Стерadian (ср, sr) равен телесному углу с вершиной в центре сферы, вырезающему на поверхности сферы площадь, равную площади квадрата со стороной, по длине равной радиусу сферы.

5. Пробег α -частиц в воздухе при нормальных условиях в зависимости от энергии α -частиц

Энергия (МэВ)	Пробег (см)	Энергия (МэВ)	Пробег (см)
1,0	0,50	7,0	5,94
2,0	1,00	8,0	7,37
3,0	1,67	9,0	8,93
4,0	2,51	10,0	10,62
5,0	3,51	15,0	21,00
6,0	4,66	20,0	34,37

**6. Линейный коэффициент ослабления γ -излучения
в некоторых веществах в зависимости от энергии излучения**

Энергия γ -излучения E_γ (МэВ)	Линейный коэффициент ослабления (см ⁻¹)	Энергия γ -излучения E_γ (МэВ)	Линейный коэффициент ослабления (см ⁻¹)
1. Бетон (плотность $2,3 \cdot 10^3$ (кг/м ³))			
0,10	0,390	1,2	0,129
0,15	0,317	1,3	0,124
0,20	0,275	1,4	0,120
0,25	0,252	1,5	0,117
0,30	0,236	1,6	0,112
0,40	0,214	1,7	0,109
0,50	0,194	1,8	0,106
0,60	0,179	1,9	0,102
0,70	0,167	2,0	0,100
0,80	0,157	2,5	0,090
0,90	0,150	3,0	0,080
1,00	0,141	4,0	0,071
1,10	0,134	5,0	0,064
2. Алюминий (плотность $2,7 \cdot 10^3$ (кг/м ³))			
0,01	72,360	0,90	0,176
0,02	9,407	1,00	0,166
0,03	3,046	1,10	0,158
0,04	1,510	1,20	0,152
0,05	0,972	1,30	0,146
0,06	0,729	1,40	0,141
0,08	0,524	1,50	0,137
0,10	0,444	1,60	0,131
0,15	0,362	1,70	0,128
0,02	0,323	1,80	0,124
0,25	0,296	1,90	0,120
0,30	0,278	2,00	0,117
0,40	0,251	2,50	0,106
0,50	0,228	3,00	0,094
0,60	0,210	4,00	0,084
0,70	0,196	5,00	0,075
0,80	0,184	6,00	0,072

Окончание

Энергия γ -излучения E_γ (МэВ)	Линейный коэффициент ослабления (см ⁻¹)	Энергия γ -излучения E_γ (МэВ)	Линейный коэффициент ослабления (см ⁻¹)
3. Свинец (плотность $11,34 \cdot 10^3$ (кг/м ³))			
0,01	959,60	0,9	0,86
0,02	814,50	1,0	0,79
0,03	266,10	1,1	0,72
0,04	119,00	1,2	0,68
0,05	65,00	1,3	0,64
0,06	40,30	1,4	0,60
0,08	18,80	1,5	0,58
0,10	60,00	1,6	0,55
0,15	24,40	1,7	0,54
0,20	11,80	1,8	0,53
0,25	6,58	1,9	0,52
0,30	4,76	2,0	0,51
0,35	3,31	2,5	0,47
0,40	2,51	3,0	0,46
0,50	1,72	4,0	0,47
0,60	1,37	5,0	0,49
0,70	1,12	6,0	0,51
0,80	0,99	—	—

7. Распределение электронов по оболочкам в элементах

Эле- мент	Атом- ный номер	Иониза- ционный потен- циал (эВ)	Распределение электронов по оболочкам										
			<i>K</i>	<i>L</i>		<i>M</i>			<i>N</i>				<i>O</i>
			1 <i>s</i>	2 <i>s</i>	2 <i>p</i>	3 <i>s</i>	3 <i>p</i>	3 <i>d</i>	4 <i>s</i>	4 <i>p</i>	4 <i>d</i>	4 <i>f</i>	5 <i>s</i>
H	1	13,529	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
He	2	24,465	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Li	3	5,370	2	2	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Be	4	9,281	2	2	—	—	—	—	—	—	—	—	—
B	5	8,280	2	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—
C	6	11,217	2	2	2	—	—	—	—	—	—	—	—
N	7	14,480	2	2	3	—	—	—	—	—	—	—	—
O	8	13,550	2	2	4	—	—	—	—	—	—	—	—
F	9	18,600	2	2	5	—	—	—	—	—	—	—	—
Ne	10	21,470	2	2	6	—	—	—	—	—	—	—	—

Продолжение

Эле- мент	Атом- ный номер	Иониза- ционный потен- циал (эВ)	Распределение электронов по оболочкам														
			<i>K</i>	<i>L</i>		<i>M</i>			<i>N</i>				<i>O</i>				
			<i>1s</i>	<i>2s</i>	<i>2p</i>	<i>3s</i>	<i>3p</i>	<i>3d</i>	<i>4s</i>	<i>4p</i>	<i>4d</i>	<i>4f</i>	<i>5s</i>				
Na	11	5,12	Замкнутая оболочка неона, 10 электро- нов в оболочке			1	—	—	—	—	—	—	—				
Mg	12	7,61				2	—	—	—	—	—	—	—	—			
Al	13	5,96				2	1	—	—	—	—	—	—	—			
Si	14	8,12				2	2	—	—	—	—	—	—	—			
P	15	10,90				2	3	—	—	—	—	—	—	—			
S	16	10,30				2	4	—	—	—	—	—	—	—			
Cl	17	12,96				2	5	—	—	—	—	—	—	—			
Ar	18	15,69				2	6	—	—	—	—	—	—	—			
K	19	4,320	Замкнутая оболочка аргона, 18 электронов в оболочке						—	1	—	—	—	—			
Ca	20	6,090							—	2	—	—	—	—	—	—	—
Sc	21	6,700							1	2	—	—	—	—	—	—	—
Ti	22	6,810							3	2	—	—	—	—	—	—	—
V	23	6,760							3	2	—	—	—	—	—	—	—
Cr	24	6,740							5	1	—	—	—	—	—	—	—
Mn	25	7,410							5	2	—	—	—	—	—	—	—
Fe	26	7,830							6	2	—	—	—	—	—	—	—
Co	27	8,500							7	2	—	—	—	—	—	—	—
Ni	28	7,606							8	2	—	—	—	—	—	—	—
Cu	29	7,680							10	1	—	—	—	—	—	—	—
Zn	30	9,360							10	2	—	—	—	—	—	—	—
Ga	31	5,970							10	2	1	—	—	—	—	—	—
Ge	32	8,090							10	2	2	—	—	—	—	—	—
As	33	10,000							10	2	3	—	—	—	—	—	—
Se	34	9,500							10	2	4	—	—	—	—	—	—
Br	35	11,800							10	2	5	—	—	—	—	—	—
Kr	36	13,940							10	2	6	—	—	—	—	—	—
Rb	37	4,159							—	—	—	—	—	—	—	—	1
Sr	38	5,667							—	—	—	—	—	—	—	—	2
Y	39	6,500							—	—	—	—	1	—	—	—	2
Zr	40	6,920							—	—	—	—	2	—	—	—	2
Nb	41	6,800							—	—	—	—	4	—	—	—	1
Mo	42	7,350							—	—	—	—	5	—	—	—	1
Tc	43	7,100							—	—	—	—	6	—	—	—	1
Ru	44	7,700							—	—	—	—	7	—	—	—	1
Rh	45	7,700							—	—	—	—	8	—	—	—	1
Pd	46	8,300							—	—	—	—	10	—	—	—	—

Продолжение

Эле- мент	Атом- ный номер	Иониза- ционный потен- циал (эВ)	Распределение электронов по оболочкам											
			K, L, M, N	O					P				Q	
			$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f, 5g$	$6s$	$6p$	$6d$	$6f, 6g, 6h$	$7s$	$7p$
Ag	47	7,54	Обо- лочка палла- дия, 46 элек- тронов в оболочке	—	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Cd	48	8,96		—	2	—	—	—	—	—	—	—	—	—
In	49	5,76		—	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—
Sn	50	7,30		—	2	2	—	—	—	—	—	—	—	—
Sb	51	8,50		—	2	3	—	—	—	—	—	—	—	—
Te	52	8,96		—	2	4	—	—	—	—	—	—	—	—
J	53	10,6		—	2	5	—	—	—	—	—	—	—	—
Xe	54	12,1		—	2	6	—	—	—	—	—	—	—	—
Cs	55	3,87	Замкнутая оболочка ксенона, 54 электрона в оболочке				—	—	1	—	—	—	—	—
Ba	56	—					—	—	2	—	—	—	—	—
La	57	5,60	Обо- лочка от $1s$ до $4d$ содержит 46 элек- тронов		2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Ce	58	6,54		1	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Pr	59	—		2	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Nd	60	—		3	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Pm	61	—		4	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Sm	62	—		5	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Eu	63	5,64		6	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Cd	64	6,16		7	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Tb	65	—		8	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Dy	66	—		9	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Ho	67	—		10	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Er	68	—		11	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—
Tm	69	—		13	2	6	0	—	2	—	—	—	—	—
Yb	70	—		14	2	6	0	—	2	—	—	—	—	—
Lu	71	—		14	2	6	1	—	2	—	—	—	—	—

Окончание

Эле- мент	Атом- ный номер	Иониза- ционный потен- циал (эВ)	Распределение электронов по оболочкам															
			K, L, M, N	O					P				Q					
				$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$5f, 5g$	$6s$	$6p$	$6d$	$6f, 6g, 6h$	$7s$	$7p$			
Hf	72	—	Оболочка от $1s$ до $5p$ содержит 68 электронов							2	—	2	—	—	—	—	—	
Ta	73	—								3	—	2	—	—	—	—	—	—
W	74	7,94								4	—	2	—	—	—	—	—	—
Re	75	—								4	—	2	—	—	—	—	—	—
Os	76	—								6	—	2	—	—	—	—	—	—
Ir	77	—								7	—	2	—	—	—	—	—	—
Pt	78	8,90								9	—	1	—	—	—	—	—	—
Au	79	9,20								10	—	1	—	—	—	—	—	—
Hg	80	10,40	Оболочка от $1s$ до $5p$ содержит 78 электронов							2	—	—	—	—	—	—		
Ti	81	6,07								2	1	—	—	—	—	—		
Pb	82	7,38								2	2	—	—	—	—	—		
Bi	83	8,00								2	3	—	—	—	—	—		
Po	84	—								2	4	—	—	—	—	—		
At	85	—								2	5	—	—	—	—	—		
Rn	86	10,70								2	6	—	—	—	—	—		
Fr	87	—	Замкнутая оболочка радона содержит 86 электронов							—	—	—	—	1	—	—		
Ra	88	—								—	—	—	—	2	—	—		
Ac	89	—								—	1	—	—	2	—	—		
T	90	—								—	2	—	—	2	—	—		
Pa	91	—								—	3	—	—	2	—	—		
U	92	—								—	4	—	—	2	—	—		

8. Массы некоторых стабильных атомов (в у. е.), их распространенность (в %) и спин (в единицах $\hbar/2\pi$)

Атом	Масса	Распространенность	Спиновое число
1_1H	1,00783	$99,9849 \div 99,9861$	1/2
2_1H	2,01410	$0,0139 \div 0,0151$	1
3_1He	3,01603	$1,3 \cdot 10^{-4} \div 1,7 \cdot 10^{-5}$	1/2
4_1He	4,00260	~ 100	0
6_3Li	6,01513	7,52	1

Продолжение

Атом	Масса	Распространенность	Спиновое число
${}^7_3\text{Li}$	7,01601	92,48	3/2
${}^9_4\text{Be}$	9,01219	100	3/2
${}^{10}_5\text{B}$	10,01294	18,45 ÷ 18,98	3
${}^{11}_5\text{B}$	11,00930	81,02 ÷ 81,55	3/2
${}^{12}_6\text{C}$	12,00000	98,89	0
${}^{13}_6\text{C}$	13,00335	1,11	1/2
${}^{14}_7\text{N}$	14,00307	99,635	1
${}^{15}_7\text{N}$	15,00011	0,365	1/2
${}^{16}_8\text{O}$	15,99491	99,759	0
${}^{17}_8\text{O}$	16,99913	0,037	5/2
${}^{18}_8\text{O}$	17,99916	0,204	0
${}^{19}_9\text{F}$	18,99840	100	1/2
${}^{20}_{10}\text{Ne}$	19,99244	90,92	0
${}^{21}_{10}\text{Ne}$	20,99385	0,257	5/2, 3/2
${}^{22}_{10}\text{Ne}$	21,99138	8,82	0
${}^{23}_{11}\text{Na}$	22,98977	100	3/2
${}^{24}_{12}\text{Mg}$	23,98504	78,60	0
${}^{25}_{12}\text{Mg}$	24,98584	19,11	5/2
${}^{26}_{12}\text{Mg}$	25,98259	11,29	0
${}^{27}_{13}\text{Al}$	26,98153	100	5/2
${}^{28}_{14}\text{Si}$	27,97693	92,27	0
${}^{29}_{14}\text{Si}$	28,97694	4,68	1/2
${}^{30}_{14}\text{Si}$	29,97376	3,05	0
${}^{31}_{15}\text{P}$	30,97376	100	1/2
${}^{32}_{16}\text{S}$	31,97207	95,018	0
${}^{33}_{16}\text{S}$	32,97146	0,750	3/2
${}^{34}_{16}\text{S}$	33,96786	4,215	0
${}^{36}_{16}\text{S}$	—	0,017	0
${}^{35}_{17}\text{Cl}$	34,96885	75,4	3/2
${}^{37}_{17}\text{Cl}$	36,96590	24,6	3/2
${}^{36}_{18}\text{Ar}$	35,96755	0,337	0
${}^{38}_{18}\text{Ar}$	37,96272	0,036	—
${}^{40}_{18}\text{Ar}$	39,96238	99,600	0

Продолжение

Атом	Масса	Распространенность	Спиновое число
³⁹ ₁₈ K	38,96371	93,08	3/2
⁴¹ ₁₈ K	40,96184	6,91	3/2
⁴⁰ ₂₀ Ca	39,96259	96,97	0
⁴² ₂₀ Ca	—	0,64	0
⁴³ ₂₀ Ca	—	0,145	7/2
⁴⁴ ₂₀ Ca	—	2,06	0
⁴⁶ ₂₀ Ca	—	0,185	0
⁴⁵ ₂₁ Sc	—	100	7/2
⁴⁶ ₂₂ Ti	45,95263	7,95	0 ⁴⁰ ₂₀ Ca
⁴⁷ ₂₂ Ti	46,95176	7,75	5/2
⁴⁸ ₂₂ Ti	47,94795	73,45	0
⁴⁹ ₂₂ Ti	48,94787	5,51	7/2
⁵⁰ ₂₂ Ti	49,94479	5,34	0
⁵⁰ ₂₃ V	49,94726	0,24	6
⁵¹ ₂₃ V	50,94398	99,76	7/2
⁵⁰ ₂₄ Cr	—	4,31	0
⁵² ₂₄ Cr	51,94051	83,76	0
⁵³ ₂₄ Cr	—	9,55	3/2
⁵⁴ ₂₄ Cr	—	2,38	0
⁵⁵ ₂₅ Mn	54,93805	100	5/2
⁵⁴ ₂₆ Fe	—	5,84	0
⁵⁶ ₂₆ Fe	55,93493	91,68	0
⁵⁷ ₂₆ Fe	—	2,17	3/2, 1/2
⁵⁸ ₂₆ Fe	—	0,31	0
⁵⁹ ₂₇ Co	58,93319	100	7/2
⁵⁸ ₂₈ Ni	57,93534	67,76	0
⁶⁰ ₂₈ Ni	—	26,16	0
⁶¹ ₂₈ Ni	60,94928	1,25	3/2
⁶² ₂₈ Ni	—	3,66	0
⁶⁴ ₂₈ Ni	—	1,16	0
⁶³ ₂₉ Cu	62,92959	69,1	3/2
⁶⁵ ₂₉ Cu	64,92779	30,9	3/2
⁶⁴ ₃₀ Zn	63,92914	48,89	0

Продолжение

Атом	Масса	Распространенность	Спиновое число
⁶⁶ ₃₀ Zn	65,92605	27,81	0
⁶⁷ ₃₀ Zn	66,92715	4,11	5/2
⁶⁸ ₃₀ Zn	67,92486	18,56	0
⁷⁰ ₃₀ Zn	—	0,62	0
⁷⁵ ₃₃ As	74,92158	100	3/2
⁸⁵ ₃₇ Rb	84,91171	72,15	5/2
⁸⁴ ₃₈ Sr	83,91338	0,56	0
⁸⁶ ₃₈ Sr	85,90926	9,86	0
⁸⁷ ₃₈ Sr	86,90889	7,02	9/2
⁸⁸ ₃₈ Sr	87,90561	82,56	0
⁸⁹ ₃₉ Y	88,90543	100	1/2
⁹² ₄₂ Mo	—	15,86	0
⁹⁴ ₄₂ Mo	—	9,12	0
⁹⁵ ₄₂ Mo	—	15,70	5/2
⁹⁶ ₄₂ Mo	—	16,50	0
⁹⁷ ₄₂ Mo	—	9,45	5/2
⁹⁸ ₄₂ Mo	97,90551	23,75	0
¹⁰⁰ ₄₂ Mo	99,93829	9,62	0
¹⁰⁷ ₄₇ Ag	106,90497	51,35	1/2
¹⁰⁹ ₄₇ Ag	108,90470	48,65	1/2
¹⁰⁶ ₄₈ Cd	—	1,215	—
¹⁰⁸ ₄₈ Cd	107,90400	0,875	—
¹¹⁰ ₄₈ Cd	—	12,39	0
¹¹¹ ₄₈ Cd	—	12,75	1/2
¹¹² ₄₈ Cd	—	24,07	0
¹¹³ ₄₈ Cd	112,90461	12,26	1/2
¹¹⁴ ₄₈ Cd	113,90357	28,86	0
¹¹⁶ ₄₈ Cd	—	7,58	0
¹¹³ ₄₉ In	112,90423	4,23	9/2
¹¹⁵ ₄₉ In	114,90407	95,77	9/2
¹²⁷ ₅₃ J	126,90435	100	5/2
¹³³ ₅₅ Cs	132,90509	100	7/2
¹³⁸ ₅₇ La	—	0,089	7/2
¹³⁹ ₅₇ La	138,90606	99,911	—

Окончание

Атом	Масса	Распространенность	Спиновое число
¹³⁶ ₅₈ Ce	—	0,193	—
¹³⁸ ₅₈ Ce	—	0,250	—
¹⁴⁰ ₅₈ Ce	139,90526	88,48	—
¹⁴² ₅₈ Ce	—	11,07	—
¹⁴⁴ ₆₂ Sm	—	3,16	—
¹⁴⁷ ₆₂ Sm	146,91462	15,07	7/2
¹⁴⁸ ₆₂ Sm	—	11,27	—
¹⁴⁹ ₆₂ Sm	—	13,84	7/2
¹⁵⁰ ₆₂ Sm	—	7,47	—
¹⁵² ₆₂ Sm	151,91949	26,63	—
¹⁹³ ₇₇ Ir	192,96328	61,5	3/2
¹⁹⁷ ₇₉ Au	196,96655	100	3/2
¹⁹⁶ ₈₀ Hg	—	0,146	—
¹⁹⁸ ₈₀ Hg	—	10,02	0
¹⁹⁹ ₈₀ Hg	—	16,84	1/2
²⁰⁰ ₈₀ Hg	199,96834	23,13	0
²⁰¹ ₈₀ Hg	—	13,22	3/2
²⁰² ₈₀ Hg	—	29,80	0
²⁰⁴ ₈₀ Hg	—	6,85	—
²⁰⁴ ₈₂ Pb	—	1,48	0
²⁰⁶ ₈₂ Pb	205,97446	23,6	0
²⁰⁷ ₈₂ Pb	206,97590	22,6	1/2
²⁰⁸ ₈₂ Pb	207,97664	52,3	0
²⁰⁹ ₈₃ Bi	208,98042	100	9/2

9. Массы некоторых радиоактивных изотопов, тип распада, период полураспада, энергия излучения

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
¹ ₀ n	1,00867	β^-	11,7 мин	0,78
³ ₁ H	3,01605	β^-	12,262 г	0,01795

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
${}^8_3\text{Li}$	8,02249	β^- 2α	0,875 с	13 (90 %); 6 (5 %); 3 (5 %); 3,2
${}^7_4\text{Be}$	7,01693	Электронный захват (э. з.)	52,93 сут	–
${}^8_4\text{Be}$	8,00531	2α	$4 \cdot 10^{-4}$ с	0,479
${}^{10}_4\text{Be}$	10,01354	β^-	$2,5 \cdot 10^6$ л	0,555
${}^{11}_6\text{C}$	11,01143	β^+	20,4 мин	0,99
${}^{14}_6\text{C}$	14,00324	β^-	5568 л	0,155
${}^{13}_7\text{N}$	13,00574	β^+	10,5 мин	1,24
${}^{21}_{11}\text{Na}$	20,99764	β^+	22,8 с	2,53
${}^{22}_{11}\text{Na}$	21,99138	β^+ γ	2,6 л	0,540; 1,83 (0,06 %); 1,28
${}^{24}_{11}\text{Na}$	23,99097	β^- γ	15,0 ч	1,39; 4,17 (0,003 %); 1,37; 2,75
${}^{27}_{12}\text{Mg}$	26,98435	β^- γ	9,5 мин	1,8 (80 %); 0,9 (20 %); 1,01; 0,84
${}^{28}_{13}\text{Al}$	27,98191	β^- γ	2,3 мин	2,865; 1,782
${}^{29}_{13}\text{Al}$	28,98044	β^- γ	6,56 мин	2,5 (70 %); 1,4 (30 %); 1,2; 2,3
${}^{27}_{14}\text{Si}$	26,986701	β^+	5,0 с	3,5
${}^{31}_{14}\text{Si}$	30,97535	β^-	2,62 ч	1,471
${}^{29}_{15}\text{P}$	28,98182	β^+	4,45 с	3,945
${}^{30}_{15}\text{P}$	29,97832	β^+	2,55 мин	3,24
${}^{32}_{15}\text{P}$	31,97391	β^-	14,30 сут	1,701
${}^{34}_{15}\text{P}$	33,97394	β^- γ	12,4 с	5,1 (75 %); 3,2 (25 %); 2,1
${}^{35}_{16}\text{S}$	34,96903	β^-	87,1 сут	0,169
${}^{37}_{16}\text{S}$	36,97104	β^- γ	5,0 мин	4,3 (10 %); 1,6 (90 %); 2,7
${}^{36}_{17}\text{Cl}$	35,96831	β^-	$3,1 \cdot 10^5$ л	0,714
${}^{38}_{17}\text{Cl}$	37,96800	β^- γ	38,5 мин	4,8 (53 %); 2,77 (16 %); 1,11 (31 %); 2,15; 1,60

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
$^{39}_{17}\text{Cl}$	38,96800	β^- γ	55,5 мин	1,65 (93 %); 2,96 (7 %); 1,35; 0,35
$^{37}_{18}\text{Ar}$	36,96677	Э. з	34,0 сут	–
$^{39}_{18}\text{Ar}$	38,96432	β^-	265 л	–
$^{37}_{19}\text{K}$	36,97336	β^+	1,2 с	5,1
$^{40}_{19}\text{K}$	39,96401	β^- (89 %) Э. з (11 %) γ	$1,31 \cdot 10^9$ л	1,33 1,46
$^{41}_{20}\text{Ca}$	40,96228	Э. з	$1,1 \cdot 10^5$ л	–
$^{45}_{20}\text{Ca}$	44,95619	β^-	163 сут	0,254
$^{48}_{24}\text{Cr}$	47,95376	Э. з	24 ч	–
$^{56}_{25}\text{Mn}$	55,93891	β^- γ	2,574 ч	0,65 (20 %); 1,04 (30 %); 2,81 (50 %); 0,822; 1,77; 2,06
$^{59}_{26}\text{Fe}$	58,93487	β^- γ	47,1 сут	0,27 (46 %); 0,462 (54 %); 1,56 (0,3 %); 1,29; 1,10; 0,19
$^{58}_{27}\text{Co}$	57,93575	β^+ Э. з	71,3 сут	0,472; 0,805
$^{60}_{27}\text{Co}$	59,93381	β^- γ	5,27 л	0,306 (~ 100 %); 1,482 (0,05 %); 1,33; 1,17
$^{65}_{28}\text{Ni}$	64,93004	β^- γ	2,6 ч	2,10 (57 %); 1,01 (14 %); 0,60 (29 %); 1,49; 1,12; 0,37
$^{61}_{29}\text{Cu}$	60,93344	β^+ (68 %) Э. з. (32 %) γ	3,33 ч	1,205 (96 %); 0,55 (4 %); 0,655; 0,284
$^{64}_{29}\text{Cu}$	63,92976	β^+ (19 %) β^- (39 %) Э. з. (42 %) γ	12,88 ч	0,657; 1,34
$^{66}_{29}\text{Cu}$	65,92887	β^- γ	4,3 мин	2,63 (91 %); 1,5 (9 %); 1,03; 0,83

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
$^{65}_{30}\text{Zn}$	64,92923	β^+ (2,5 %) Э. з. (97,5 %) γ	250 сут	0,325; 1,120
$^{76}_{33}\text{As}$	75,92242	β^- γ	26,75 ч	3,04 (60 %); 2,5 (25 %); 1,3 (15 %); 0,55; 1,2; 0,7
$^{75}_{34}\text{Se}$	74,92251	Э. з. γ	128 сут	0,067; 0,077; 0,098; 0,124; 0,138; 0,202; 0,269; 0,281; 0,308; 0,405
$^{78}_{35}\text{Br}$	77,92107	β^+ γ	6,4 мин	2,4; 0,108; 0,046
$^{80}_{35}\text{Br}$	79,91854	β^- (~ 92 %) β^+ (~ 3 %) Э. з. γ	18 мин	1,99 (85 %); 1,1 (15 %); 0,6
$^{82}_{35}\text{Br}$	81,91680	β^- γ	36 ч	0,465; 0,547; 0,608; 0,692; 0,766; 0,823; 1,031; 1,312
$^{87}_{37}\text{Rb}$	86,90918	β^-	$5 \cdot 10^{10}$ л	0,275
$^{89}_{38}\text{Sr}$	88,90701	β^-	54 сут	1,463
$^{90}_{38}\text{Sr}$	89,90733	β^-	28,9 л	0,61
$^{90}_{39}\text{Y}$	89,90674	β^-	61 ч	2,18
$^{91}_{39}\text{Y}$	90,90691	β^- γ	61 сут	1,564; 1,2; 0,2
$^{95}_{40}\text{Zr}$	94,90792	β^- γ	65 сут	0,37 (99 %); 0,841 (1 %); 0,721
$^{108}_{47}\text{Ag}$	107,90589	β^- (98,5 %) Э. з. (1,5 %) γ	2,3 мин	1,5; 0,45; 0,66
$^{110}_{47}\text{Ag}$	109,90665	β^- γ	24,2 с	2,24 (60 %); 2,82 (40 %); 0,66
$^{115}_{48}\text{Cd}$	114,90562	β^- γ	53 ч	1,11 (58 %); 0,58 (42 %); 0,335; 0,360; 0,50; 0,525

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
$^{117m}_{48}\text{Cd}$	116,90736	Изомерный переход	2,9 ч	1,2
$^{115}_{49}\text{In}$	114,90407	β^-	$6 \cdot 10^{14}$ л	0,63
$^{117}_{49}\text{In}$	116,90464	β^- γ	1,95 ч	1,73; 0,161; 0,558
$^{129}_{52}\text{Te}$	128,90658	β^- γ	70 мин	1,8; 0,3; 0,8
$^{131}_{52}\text{Te}$	130,90858	β^- γ	24,8 ч	2 (55 %); 1,4 (45 %); 0,16; 0,7
$^{128}_{53}\text{J}$	127,90582	β^- (95 %) β^+ (5 %) Э. з. γ	25 мин	2,02
$^{131}_{53}\text{J}$	130,90613	β^- γ	8,14 сут	0,428; 0,815 (0,7 %); 0,608 (87,2%); 0,335 (9,3 %); 0,250 (2,8 %); 0,080; 0,28; 0,36
$^{134}_{53}\text{J}$	133,90984	β^- γ	52,5 мин	1,6 (70 %); 2,8 (30 %); 0,86; 1,10; 1,78
$^{137}_{55}\text{Cs}$	136,90682	β^- γ	30 л	0,51 (92 %); 1,17 (8 %); 0,66
$^{140}_{56}\text{Ba}$	139,91046	β^- γ	13,4 сут	1,011 (60 %); 0,48 (40 %); 0,0296; 0,132; 0,162; 0,303; 0,537
$^{141}_{56}\text{Ba}$	140,91374	β^-	18 мин	2,8
$^{140}_{57}\text{La}$	139,90933	β^- γ	40 ч	1,32 (70 %); 1,67 (20 %); 2,26 (10 %); 0,093; 0,335; 0,490; 0,820; 1,60; 2,50; 3,0
$^{141}_{57}\text{La}$	140,91062	β^- γ	3,7 ч	2,43 (95 %); 0,9 (5 %); 0,630; 0,870
$^{141}_{58}\text{Ce}$	140,90801	β^- γ	33,1 сут	0,581 (33 %); 0,442 (67 %); 0,145

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
¹⁴⁷ ₆₁ <i>Pm</i>	146,91486	β^-	2,64 г	0,227
¹⁴⁷ ₆₂ <i>Sm</i>	146,91462	α	$1,4 \cdot 10^{11}$ л	2,18
¹⁵² ₆₃ <i>Eu</i>	151,92148	β^- Э. з. γ	12,7 л	1,7 (20 %); 0,9 (80 %) 0,122; 0,123; 0,244; 0,344; 0,720; 0,964; 1,086
¹⁹² ₇₇ <i>Ir</i>	191,96299	β^- Э. з. γ	74,34 сут	0,66; 0,14; 0,20; 0,31; 0,47; 0,48
¹⁹⁴ ₇₇ <i>Ir</i>	193,96521	β^- γ	19,0 ч	2,18; 0,290; 0,326; 1,51
¹⁹⁷ ₇₈ <i>Pt</i>	196,96736	β^- γ	18 ч	0,670; 0,077; 0,191
¹⁹⁹ ₇₈ <i>Pt</i>	198,97066	β^-	31 мин	1,8
¹⁹⁸ ₇₉ <i>Au</i>	197,96824	β^- γ	2,7 сут	0,963; 0,41
²⁰³ ₈₀ <i>Hg</i>	202,97285	β^- γ	47,9 сут	0,208; 0,279
²⁰⁷ ₈₁ <i>Tl</i> (AcC'')	—	β^-	4,79 мин	1,44
²⁰⁸ ₈₁ <i>Tl</i> (ThC'')	207,98064	β^-	3,1 мин	1,792
²¹⁰ ₈₁ <i>Tl</i> (RaC'')	—	β^-	1,32 мин	1,96
²¹⁰ ₈₂ <i>Pb</i> (RaD)	209,98418	β^-	22 г	0,018 (84,5%); 0,065 (15,5 %)
²¹¹ ₈₂ <i>Pb</i> (AcB)	—	β^-	36,1 мин	1,39 (80 %), 0,5 (20 %)
²¹² ₈₂ <i>Pb</i> (ThB)	211,99190	β^- γ	11 ч	0,355; 0,589; 0,415; 0,30; 0,25; 0,238
²¹⁴ ₈₂ <i>Pb</i> (RaB)	213,99976	β^- γ	26,8 мин	0,65 (44 %); 0,59 (56 %); 0,352; 0,295

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
$^{210}_{83}\text{Bi}$ (RaE)	209,98411	β^- (~ 100 %) α ($5 \cdot 10^{-5}$ %)	4,989 сут	1,17
$^{211}_{83}\text{Bi}$ (AcC)	—	α (99,68 %) β^- (0,32 %)	2,16 мин	6,618 (84 %); 6,272 (16 %)
$^{212}_{83}\text{Bi}$ (ThC)	—	β^- (66,3 %) α (33,7 %)	60,5 мин	2,250; 6,086 (27,2 %); 6,047 (69,9 %); 5,765 (1,7 %); 5,622 (0,15 %); 5,603 (1,1 %); 5,481 (0,016 %)
$^{214}_{83}\text{Bi}$ (RaC)	—	β^- α	19,7 мин	3,17 (23 %); 1,65 (77 %); 5,505 (45 %); 5,444 (55 %)
$^{210}_{84}\text{Po}$	209,98287	α β^+ γ	138,4 сут	5,297; 4,5; 3,3; 0,8
$^{211}_{84}\text{Po}$ (AcC')	—	α	0,52 с	7,434; 6,88; 5,56
$^{212}_{84}\text{Po}$ (ThC')	211,98886	α	$3,04 \cdot 10^{-7}$ с	8,776; 10,536 (0,017 %); 10,417 (0,002 %); 9,489 (0,004 %)
$^{214}_{84}\text{Po}$ (RaC')	213,99519	α	$1,637 \cdot 10^{-4}$ с	7,680; 9,069 (0,002 %)
$^{215}_{84}\text{Po}$ (AcA)	—	α (> 99 %) β^- ($5 \cdot 10^{-4}$ %)	$1,83 \cdot 10^{-3}$ с	7,365; 9,5 ($4 \cdot 10^{-6}$ %)
$^{216}_{84}\text{Po}$	—	α	0,158 с	6,774
$^{218}_{84}\text{Po}$ (RaA)	218,00893	α β^- (0,03 %)	3,05 мин	5,998
$^{219}_{86}\text{Rn}$ (An)	—	α	3,92 с	6,824; 6,559; 6,434
$^{220}_{86}\text{Rn}$ (Tn)	—	α	54,5 с	6,282
$^{222}_{86}\text{Rn}$	222,01753	α γ	3,825 сут	5,486; 0,510

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
$^{223}_{87}\text{Fr}$ (AcK)	—	β^- α ($4 \cdot 10^{-3}$ %) γ	21 мин	1,0; 5,34; 0,09; 0,330; 0,0486
$^{223}_{88}\text{Ra}$ (AcX)	—	α γ	11,7 сут	5,860; 5,730 (9 %); 5,704 (53 %); 5,596 (24 %); 5,528 (9 %); 5,487 (2 %); 5,419 (3 %); 0,144; 0,155; 0,180; 0,270; 0,340
$^{224}_{88}\text{Ra}$ (ThX)	—	α	3,64 сут	5,681(95 %); 5,448 (4,6 %); 5,194 (0,4 %)
$^{226}_{88}\text{Ra}$	226,02536	α γ	1617 л	4,793 (94,3 %); 4,589 (5,7 %); 2,432; 2,204; 1,848; 1,764; 1,509; 1,378; 1,238; 1,120; 0,934; 0,769; 0,609; 0,350; 0,294; 0,241; 0,184
$^{228}_{88}\text{Ra}$ (MsTh ₁)	—	β^- γ	6,7 г	~ 0,012; ~ 0,03
$^{228}_{89}\text{Ac}$ (MsTh ₂)	—	β^- γ	6,13 ч	2,18 (10 %); 1,85 (9 %); 1,72 (7 %); 1,15 (53 %); 0,66 (8 %); 0,46 (13 %); 0,063; 0,146; 0,186; 0,338; 0,533; 0,590; 0,905
$^{227}_{90}\text{Th}$ (RdAc)	—	α γ	18,2 сут	6,030 (19 %); 6,001 (5 %); 5,972 (21 %); 5,952 (13 %); 5,992 (~ 2 %); 5,860 (4 %); 5,796 (2 %); 5,749 (17 %); 5,728 (~ 1 %); 5,704 (15 %); 5,651 (~ 2 %); 0,050; 0,120; 0,280
$^{228}_{90}\text{Th}$ (RdTh)	—	α γ	1,90 г	5,423 (72 %); 5,338 (28 %); 0,212; 0,169; 0,128; 0,084
$^{230}_{90}\text{Th}$ (Io)	—	α γ	$8,0 \cdot 10^4$ л	4,682 (75 %); 4,613 (25 %); 0,255; 0,187; 0,142; 0,068

Продолжение

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
$^{231}_{90}\text{Th}$ (UY)	—	β^- γ	25,64 ч	0,302 (44 %); 0,216 (11 %); 0,094 (45 %); 0,230; 0,208; 0,167; 0,123; 0,107; 0,073; 0,060; 0,022
$^{232}_{90}\text{Th}$	232,03821	α γ	$1,39 \cdot 10^{10}$ л	3,98; 3,905; 0,059
$^{233}_{90}\text{Th}$	233,04143	β^- γ	23,3 мин	1,23; 0,098; 0,172; 0,350; 0,448; 0,662
$^{234}_{90}\text{Th}$ (UX ₁)	—	β^-	24,1 сут	0,205 (80 %); 0,111 (20 %)
$^{234}_{91}\text{Pa}$ (UZ)	—	β^-	6,7 ч	0,155 (28 %); 0,32 (32 %); 0,53 (27 %); 1,13 (13 %)
$^{234}_{92}\text{U}$ (UII)	234,04090	α γ	$2,48 \cdot 10^5$ л	4,763; 4,716; 0,118; 0,052
$^{235}_{92}\text{U}$ (AcU)	235,04393	α γ	$7,13 \cdot 10^8$ л	4,58 (10 %); 4,47 (~ 3 %); 4,39 (83 %); 4,20 (4 %); 0,382; 0,289; 0,198; 0,184; 0,110; 0,074
$^{236}_{92}\text{U}$	236,04573	α γ	$2,4 \cdot 10^7$ л	4,499; 4,45; 0,114; 0,050
$^{237}_{92}\text{U}$	237,04858	β^- γ	6,63 сут	0,245; 0,430; 0,334; 0,269; 0,207; 0,165; 0,102; 0,059; 0,043; 0,027
$^{238}_{92}\text{U}$	238,05076	α γ	$4,51 \cdot 10^9$ л	4,18; 4,132; 0,112; 0,048
$^{239}_{92}\text{U}$	239,05432	β^- γ	23,54 мин	1,21; 0,870; 0,073
$^{239}_{93}\text{Np}$	239,05294	β^- γ	2,33 сут	0,705; 0,286; 0,277; 0,254; 0,228; 0,209; 0,105; 0,0675; 0,0614; 0,0570; 0,0490; 0,0442
$^{238}_{94}\text{Pu}$	238,04952	α γ	89,62 л	5,493 (72 %); 5,450 (28 %); 5,352 (0,09 %); 0,150; 0,101; 0,044

Окончание

Атом	Масса (у. е.)	Тип распада	Период полураспада	Энергия излучения (МэВ)
$^{239}_{94}\text{Pu}$	239,05216	α γ	$2,411 \cdot 10^4$ л	5,238; 5,225; 5,187; 0,384; 0,200; 0,124; 0,100; 0,052; 0,0385; 0,0205; 0,0174; 0,0136
$^{240}_{94}\text{Pu}$	240,05397	α	6580 л	5,162 (76 %); 5,118 (24 %)
$^{241}_{96}\text{Cm}$	241,05751	α γ	35 сут	5,89; 0,590; 0,47

10. Некоторые искусственно полученные элементы

Атомный номер	Название	Символ	Массовые числа изотопов	Период полураспада
61	Прометий	Pm	145 – 151; 147	2,6 г
85	Астат	At	210 – 219	8,3 ч
87	Франций	Fr	219 – 223	23 мин
93	Нептуний	Np	231 – 241; 237	$2,2 \cdot 10^6$ л
94	Плутоний	Pu	236 – 246; 244	$7,5 \cdot 10^7$ л
95	Америций	Am	240 – 246; 243	$8 \cdot 10^3$ л
96	Кюрий	Cm	238 – 250; 247	$4 \cdot 10^7$ л
97	Берклий	Bk	243 – 250; 247	700 л
98	Калифорний	Cf	244 – 254; 251	660 л
99	Эйнштейний	Es	247 – 255; 254	~ 1 г
100	Фермий	Fm	250 – 256; 253	4,5 дн.
101	Менделеевский	Md	255; 256	30 мин
102	Нобелий	No	259	1,0 ч
103	Лоуренсий	Lw	257	~ 8 с

11. Потенциал ионизации атомов

Атом- ный но- мер Z	Элемент X	Конфигурация валентной оболочки – терм	Потенциал ионизации IP (эВ)
1	H	$1S-^2S_{\frac{1}{2}}$	13,5985
	D	$1S-^2S_{\frac{1}{2}}$	13,6022
	T	$1S-^2S_{\frac{1}{2}}$	13,6035
2	3_1H	$1S^2-^1S_0$	24,5863
	4_1H	$1S^2-^1S_0$	24,5876
3	Li	$2S-^2S_{\frac{1}{2}}$	5,3918
4	Be	$2S^2-^1S_0$	9,3228
5	B	$2p-^2P^0_{\frac{1}{2}}$	8,2981
6	C	$2p^2-^3P_0$	11,260
7	N	$2p^3-^4S^0_{\frac{3}{2}}$	14,534
8	O	$2p^4-^3P_2$	13,618
9	F	$2p^5-^2P^0_{\frac{3}{2}}$	17,423
10	Ne	$2p^6-^1S_0$	21,565
11	Na	$3S-^2S_{\frac{1}{2}}$	5,13912
12	Mg	$3s^2-^1S_0$	7,6463
13	Al	$3p-^2P^0_{\frac{1}{2}}$	5,98581
14	Si	$3p^2-^3P_0$	8,1517
15	P	$3p^3-^4S^0_{\frac{3}{2}}$	10,4868
16	S	$3p^4-^3P_2$	10,36012
17	Cl	$3p^5-^2P^0_{\frac{3}{2}}$	12,968
18	Ar	$3p^6-^1S_0$	15,760
19	K	$4S-^2S_{\frac{1}{2}}$	4,34070
20	Ca	$4s^2-^1S_0$	6,1132
21	Se	$3d4s^2-^2D_{\frac{3}{2}}$	6,5615
22	Ti	$3d^24s^2-^3F_2$	6,82
23	V	$3d^34s^2-^4F_{\frac{3}{2}}$	6,74

Продолжение

Атом- ный но- мер Z	Элемент X	Конфигурация валентной оболочки – терм	Потенциал ионизации IP (эВ)
24	Cr	$3d^5 4s-^7S_3$	6,766
25	Mn	$3d^5 4s^2-^6S_{5/2}$	7,43408
26	Fe	$3d^6 4s^2-^5D_4$	7,9024
27	Co	$3d^7 4s^2-^4F_{9/2}$	7,86
28	Ni	$3d^8 4s^2-^3F_4$	7,637
29	Cu	$4s-^2S_{1/2}$	7,7264
30	Zn	$4s^2-^1S_0$	9,3943
31	Ga	$4p-^2P_{1/2}^0$	5,999935
32	Ge	$4p^2-^3P_0$	7,8995
33	As	$4p^3-^4S_{3/2}^0$	9,789
34	Se	$4p^4-^3P_2$	9,752
35	Br	$4p^5-^2P_{3/2}^0$	11,814
36	Kr	$4p^6-^1S_0$	13,997
37	Rb	$5s-^2S_{1/2}$	4,17717
38	Sr	$5s^2-^1S_0$	5,69490
39	Y	$4d5s^2-^2D_{3/2}$	6,217
40	Zr	$4d^2 5s^2-^3F_2$	6,837
41	Nb	$4d^4 5s-^6D_{1/2}^0$	6,88
42	Mo	$4d^5 5s-^7S_3$	7,099
43	Te	$4d^5 5s^2-^6S_{5/2}$	7,28
44	Ru	$4d^7 5s-^5F_5$	7,366
45	Rh	$4d^8 5s-^4F_{9/2}$	7,46
46	Pd	$4d^{10}-^1S_0$	8,336
47	Ag	$5s-^2S_{1/2}$	7,5763
48	Cd	$5s^2-^1S_0$	8,9939
49	In	$5s^2 5p-^2P_{1/2}^0$	5,78640
50	Sn	$5p^2-^3P_0$	7,3440
51	Sb	$5p^3-^4S_{3/2}^0$	8,609

Продолжение

Атом- ный но- мер Z	Элемент X	Конфигурация валентной оболочки – терм	Потенциал ионизации IP (эВ)
52	Te	$5p^4 - ^3P_2$	9,010
53	I	$5p^5 - ^2P_{3/2}^0$	10,451
54	Xe	$5p^6 - ^1S_0$	12,1299
55	Cs	$6s - ^2S_{1/2}$	3,89394
56	Ba	$6s^2 - ^1S_0$	5,21171
57	La	$5d6s^2 - ^2D_{3/2}$	5,577
58	Ce	$4f5d6s^2 - ^1G_4^0$	5,539
59	Pr	$5f^36s^2 - ^4I_{9/2}^0$	5,47
60	Nd	$4f^46s^2 - ^5I_4$	5,525
61	Pm	$4f^36s^2 - ^6H_{5/2}^0$	5,58
62	Sm	$4f^66s^2 - ^7F_0$	5,644
63	Eu	$4f^76s^2 - ^8S_{7/2}^0$	5,6704
64	Gd	$4f^75d6s^2 - ^9D_2^0$	6,150
65	Tb	$4f^96s^2 - ^6H_{15/2}^0$	5,864
66	Dy	$4f^{10}6s^2 - ^5I_8$	5,939
67	Ho	$4f^{11}6s^2 - ^4I_{15/2}^0$	6,022
68	Er	$4f^{12}6s^2 - ^3H_6$	6,108
69	Tm	$4f^{13}6s^2 - ^2F_{7/2}^0$	6,184
70	Yb	$4f^{14}6s^2 - ^1S_0$	6,254
71	Lu	$4f^{14}5d6s^2 - ^2D_{3/2}$	5,426
72	Hf	$5d^26s^2 - ^3F_2$	6,8
73	Ta	$5d^36s^2 - ^4F_{3/2}$	7,89
74	W	$5d^46s^2 - ^5D_0$	7,89
75	Re	$5d^56s^2 - ^6S_{5/2}$	7,88
76	Os	$5d^66s^2 - ^5D_4$	8,73
77	Ir	$5d^76s^2 - ^4F_{9/2}$	9,05
78	Pt	$5d^96s - ^3D_3$	8,96
79	Au	$5d^{10}6s - ^2S_{1/2}$	9,2256

Окончание

Атом- ный но- мер Z	Элемент X	Конфигурация валентной оболочки – терм	Потенциал ионизации IP (эВ)
80	Hg	$6s^2 - ^1S_0$	10,4376
81	Tl	$6s^2 6p - ^2P_{1/2}^0$	6,1083
82	Pb	$6p^2 - ^3P_0$	7,4167
83	Bi	$6p^3 - ^4S_{3/2}^0$	7,2856
84	Po	$6p^4 - ^3P_2$	8,4168
85	At	$6p^5 - ^2P_{3/2}^0$	9,0
86	Rn	$6p^6 - ^1S_0$	10,75
87	Fr	$7s - ^2S_{1/2}$	4,0
88	Ra	$7s^2 - ^1S_0$	5,2785
89	Ac	$6d 7s^2 - ^2D_{3/2}$	5,2
90	Th	$6d^2 7s^2 - ^3F_2$	6,1
91	Pa	$5f^2 (^3H_4) 6d 7s^2 (4, 3/2)_{11/2}$	6,0
92	U	$5f^3 (^4I_{9/2}^0) 6d 7s^2 (9/2, 3/2)_6^0$	6,194
93	Np	$5f^4 (^5I_4) 6d 7s^2 (4, 3/2)_{11/2}$	6,266
94	Pu	$5f^6 7s^2 - ^7F_0$	6,06
95	Am	$5f^7 7s^2 - ^8S_{7/2}^0$	6,0
96	Cm	$5f^7 (^8S_{7/2}^0) 6d 7s^2 (7/2, 3/2)_2^0$	6,02
97	Bk	$5f^9 7s^2 - ^6H_{15/2}^0$	6,23
98	Cf	$5f^{10} 7s^2 - ^5I_8$	6,30
99	Es	$5f^{11} 7s^2 - ^4I_{15/2}^0$	6,42
100	Fm	$5f^{12} 7s^2 - ^3H_6$	6,5
101	Md	$5f^{13} 7s^2 - ^2F_{7/2}^0$	6,6
102	No	$5f^{14} 7s^2 - ^1S_0$	6,6

Учебное электронное издание

ФУРОВ Леонид Викторович

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И АТОМНОЙ ФИЗИКИ

Учебно-практическое пособие

Редактор Е. А. Платонова

Технический редактор Ш. Ш. Амирсейидов

Компьютерная верстка П. А. Некрасова

Корректор Н. В. Пустовойтова

Выпускающий редактор А. А. Амирсейидова

Системные требования: Intel от 1,3 ГГц; Windows XP/7/8/10; Adobe Reader;
дисковод CD-ROM.

Тираж 9 экз.

Издательство Владимирского государственного университета
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых.
600000, Владимир, ул. Горького, 87.