

Міністерство освіти і науки України  
Сумський державний університет

## **ФІЗИКА**

### ***Конспект лекцій***

для студентів напрямів підготовки: 6.050801  
“Мікро- та нанoeлектроніка”, 6.050802  
“Електронні пристрої та системи”, 6.050701  
“Електротехніка та електротехнології”,  
6.050201 “Системна інженерія”  
усіх форм навчання

### ***Частина 2***

(атомна і ядерна фізика)

Суми  
“Видавництво СумДУ”  
2010

Фізика: Конспект лекцій /Укладач О.В. Лисенко. – Суми: Вид-во СумДУ, 2010. – Ч.2. – 242 с.

Кафедра загальної та теоретичної фізики

## ЗМІСТ

### ЕЛЕМЕНТИ АТОМНОЇ ФІЗИКИ ТА КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

ТЕМА 1 БОРІВСЬКА ТЕОРІЯ АТОМА .....	1
§ 1 Дослід Резерфорда. Ядерна модель атома. Залежність кількості $\alpha$ -частинок в одиниці тілесного кута від кута розсіяння. Проблема стабільності атома з точки зору ядерної моделі атома .....	1
§ 2 Постулати Бора. Правило квантування орбіт. Досліди Франка й Герца .....	4
§ 3 Спектральні закономірності у випромінюванні атома водню. Терми. Комбінаційний принцип Рітца .....	6
§ 4 Борівська теорія воднеподібного атома. Узагальнена формула Бальмера. Стала Рідберга. Недоліки теорії Бора .....	7
ТЕМА 2 ХВИЛЬОВІ ВЛАСТИВОСТІ МІКРОЧАСТИНОК.....	9
§ 5 Гіпотеза де Бройля. Довжина хвилі де Бройля для електрона, що вільно рухається.....	9
§ 6 Досліди Девісона й Джермера. Досліди Томсона й Тартаковського .....	10
§ 7 Статистична інтерпретація хвиль де Бройля .....	12
§ 8 Співвідношення невизначеностей Гейзенберга .....	13
ТЕМА 3 КВАНТУВАННЯ ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН .....	15
§ 9 Хвильова функція. Фізична сутність $\psi$ -функції. Стандартні умови для хвильової функції .....	15
§ 10 Загальне й стаціонарне рівняння Шредінгера .....	16
§ 11 Рівняння Шредінгера та квантування енергії .....	18
§ 12 Частинка в одновимірній потенціальній ямі. Енергія і хвильова функція частинки в потенціальній ямі .....	19
§ 13 Тунельний ефект. Коефіцієнт проходження .....	21
§ 14 Оператори фізичних величин. Власні функції та власні значення. Принцип суперпозиції .....	24
§ 15 Середні значення фізичних величин з точки зору операторного підходу. Оператори радіуса-вектора, імпульсу, енергії. Зв'язок між власними й середніми значеннями .....	26
§ 16 Комутативність операторів. Умови, за яких дві фізичні величини можуть бути виміряні одночасно .....	28
§ 17 Квантування моменту імпульсу. Модуль і одна з проекцій моменту імпульсу. Азимутальне і магнітне квантові числа .....	29
ТЕМА 4 ФІЗИКА АТОМІВ І МОЛЕКУЛ.....	31
§ 18 Атом водню з погляду квантової механіки. Квантові числа: $n$ , $l$ , $m_l$ . Кратність виродження. Правило відбору .....	31
§ 19 Магнетизм атомів. Дослід Штерна й Герлаха. Спін електрона .....	35
§ 20 Принцип Паулі. Періодична система елементів Д.І. Менделєєва з погляду квантової механіки .....	38
§ 21 Спонтанне й вимушене випромінювання. Коефіцієнти Ейнштейна .....	42
§ 22 Інверсна заселеність. Лазери .....	44
ТЕМА 5 ЗОННА ТЕОРІЯ ТВЕРДИХ ТІЛ .....	48
§ 23 Енергетичні зони в кристалах. Зона провідності, заборонена зона, валентна зона. Метали, напівпровідники, діелектрики з точки зору зонної теорії ..	48
§ 24 Напівпровідники. Власні, домішкові напівпровідники. Рух електронів та дірок. Рівень Фермі. Залежність провідності власних напівпровідників від температури .....	50
§ 25 Домішкова провідність напівпровідників. Донорні рівні, акцепторні рівні .....	53
§ 26 Контакт електронного та діркового напівпровідників. Електричне поле $p$ - $n$ -переходу. Потенціальний бар'єр $p$ - $n$ -переходу. Вольт-амперна характеристика. Напівпровідниковий діод .....	55

# ЕЛЕМЕНТИ АТОМНОЇ ФІЗИКИ ТА КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

## ТЕМА 1 БОРІВСЬКА ТЕОРІЯ АТОМА

### § 1 Дослід Резерфорда. Ядерна модель атома. Залежність кількості $\alpha$ -частинок в одиниці тілесного кута від кута розсіювання. Проблема стабільності атома з точки зору ядерної моделі атома

**1 Дослід Резерфорда.** Цікавість людини є безмежною. Яка внутрішня структура атома – найдрібнішої частинки хімічного елемента? Атом є електрично нейтральним, як усередині атома розподілені додатні та від'ємні електричні заряди? Відповіді на ці питання шукали Резерфорд і його співробітники за допомогою  $\alpha$ -частинок, спостерігаючи зміну напрямку їх польоту (розсіювання), при проходженні через тонкі шари речовини.

У той час, коли Резерфорд приступав до своїх дослідів, було відомо, що  $\alpha$ -частинки випромінюються деякими речовинами при радіоактивному розпаді. Швидкості  $\alpha$ -частинок мають порядок  $10^7$  м/с. Вони мають додатний заряд, що дорівнює подвоєному елементарному заряду. При втраті цього заряду (при приєднанні двох електронів)  $\alpha$ -частинка перетворюється в атом гелію.

Дослід виконувався так (рис. 1.1).  $\alpha$ -частинки випромінювалися радіоактивною речовиною  $P$ , проходили через вузький отвір і попадали на тонку металеву фольгу  $\Phi$ . При проходженні через фольгу  $\alpha$ -частинки відхилялися від початкового напрямку руху на різні кути. Розсіяні  $\alpha$ -частинки вдарялися об екран  $E$ , який був покритий сірчистим цинком, і викликане ударами світіння спостерігалися в мікроскоп  $M$ . Мікроскоп і екран можна було обертати навколо осі, що проходить через центр розсіювальної фольги, і встановлювати під будь-яким кутом  $\theta$ . Весь прилад розміщувався у посудині, з якої було відкачано повітря. Це було зроблено для того, щоб усунути розсіювання  $\alpha$ -частинок за рахунок зіткнень із молекулами повітря.

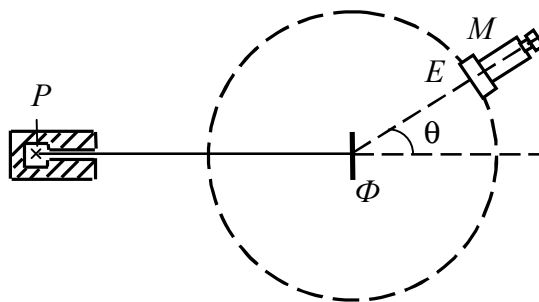


Рисунок 1.1 – Схема дослідів Резерфорда

### 2 Ядерна модель атома.

Виявилось, що деяка кількість  $\alpha$ -частинок розсіюється на дуже великі кути (майже до  $180^\circ$ ). Проаналізувавши результати дослідів, Резерфорд дійшов висновку, що настільки сильне відхилення  $\alpha$ -частинок можливо тільки в тому випадку, коли усередині атома є надзвичайно сильне електричне поле, що створюється зарядом, який пов'язаний з великою масою й сконцентрований у дуже малому об'ємі. Грунтуючись на цьому висновку, Резерфорд запропонував у 1911 р. **ядерну модель атома**. Відповідно до Резерфорда атом являє собою систему зарядів, у

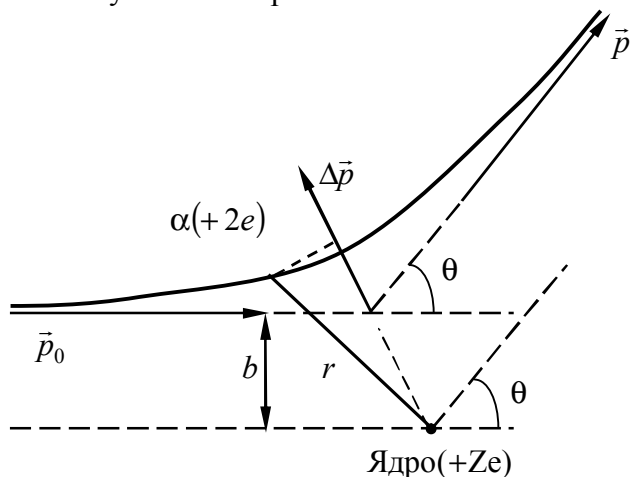


Рисунок 1.2

центрі якої розміщене важке додатне ядро із зарядом  $Ze$  із розміром не більше  $10^{-14}$  м, а навколо ядра розміщені  $Z$  електронів, що розподілені в усьому об'ємі атому. Майже вся маса атома зосереджена в ядрі.



### 3 Залежність кількості $\alpha$ -частинок в одиниці тілесного кута від кута розсіяння.

Виходячи з таких припущень, Резерфорд розробив кількісну теорію розсіювання  $\alpha$ -частинок і довів формулу для розподілу розсіяних частинок залежно від кута  $\theta$ . При доведенні формули Резерфорд міркував так. Відхилення  $\alpha$ -частинок обумовлені впливом на них атомних ядер. Помітного відхилення через взаємодію з електронами не може бути, оскільки маса електрона на чотири порядки менша від маси  $\alpha$ -частинки.

Коли частинка пролітає поблизу ядра, на неї діє кулонівська сила відштовхування

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2}. \quad (1.1)$$

У цьому випадку траєкторія частинки являє собою гіперболу. Кут між асимптотами гіперболи позначимо буквою  $\theta$  (рис. 1.2). Цей кут характеризує відхилення частинки від первісного напрямку. Відстань  $b$  від ядра до первісного напрямку польоту  $\alpha$ -частинки називається прицільним параметром. Чим ближче пролітає частинка від ядра (чим менше  $b$ ), тим, природно, сильніше вона відхиляється (тим більше  $\theta$ ). Величини  $b$  і  $\theta$  пов'язані між собою співвідношенням

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = \frac{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v^2}{2Ze^2} b, \quad (1.2)$$

яке можна довести, використовуючи закон збереження повної механічної енергії та моменту імпульсу.

Розглянемо настільки тонкий шар розсіювальної речовини, щоб кожна частинка при проходженні через нього пролітала поблизу тільки одного ядра, тобто щоб кожна частинка мала лише однократне розсіювання. Для того щоб частинка відхилилася на кут, що лежить у межах від  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ , вона повинна пролетіти поблизу одного з ядер по траєкторії, прицільний параметр якої міститься у межах від  $b$  до  $b + db$  (рис. 1.3), причому  $db$  й  $d\theta$ , як впливає з (1.2), пов'язані співвідношенням

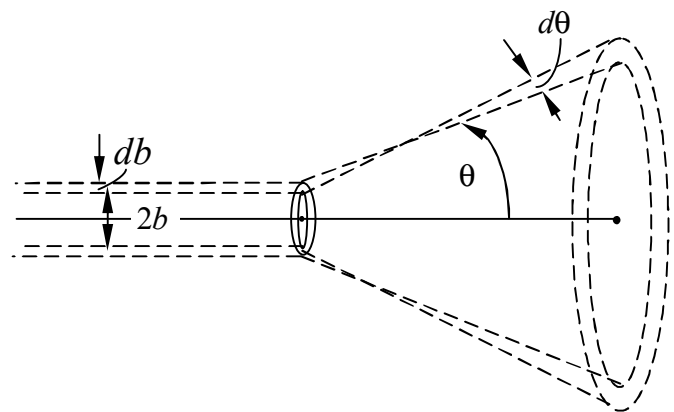


Рисунок 1.3

$$-\frac{1}{\sin^2(\theta/2)} \frac{d\theta}{2} = \frac{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v^2}{2Ze^2} db. \quad (1.3)$$

Знак мінус у цьому виразі обумовлений тим, що зі збільшенням  $b$  (тобто при  $db > 0$ ) кут відхилення зменшується ( $d\theta < 0$ ). Надалі нас буде цікавити лише абсолютне значення  $db$  у функції від  $\theta$ , і тому знак мінус ми не будемо враховувати.

Позначимо площу поперечного перерізу пучка  $\alpha$ -частинок буквою  $S$ . Тоді кількість атомів фольги на шляху пучка можна подати у вигляді  $nSa$ , де  $n$  – число атомів в одиниці об'єму,  $a$  – товщина фольги. Якщо  $\alpha$ -частинки розподілені рівномірно по перерізу пучка й число їх дуже велике (що насправді має місце), то відносна кількість  $\alpha$ -частинок, що пролітають поблизу одного з ядер по траєкторії із прицільним параметром від  $b$  до  $b + db$  (і, отже, які відхиляються в межах кутів від  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ ), буде дорівнювати відношенню відповідних площ (див. рис. 1.4):

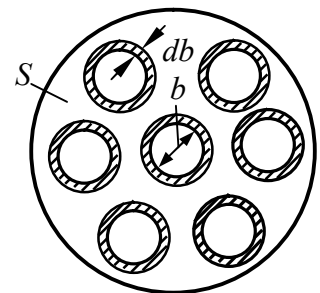


Рисунок 1.4

$$\frac{dN_\theta}{N} = \frac{nSa \cdot 2\pi b db}{S} = na2\pi b db. \quad (1.4)$$

У цьому виразі  $dN_\theta$  – потік частинок, що розсіюються в межах кутів від  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ ,  $N$  – повний потік частинок у пучку.

Замінивши у формулі (1.4)  $b$  і  $db$  через  $\theta$  і  $d\theta$  відповідно до (1.2) і (1.3), отримаємо

$$\frac{dN_\theta}{N} = na \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v^2}^2 2\pi \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \frac{1}{\sin^2(\theta/2)} \frac{d\theta}{2}. \quad (1.5)$$

Перетворимо множники, що містять кут  $\theta$ :

$$\frac{\operatorname{ctg}(\theta/2)}{\sin^2(\theta/2)} = \frac{\cos(\theta/2) \sin(\theta/2)}{\sin^4(\theta/2)} = \frac{\sin \theta}{2\sin^4(\theta/2)}.$$

З урахуванням цього перетворення

$$\frac{dN_\theta}{N} = na \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v^2}^2 \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4\sin^4(\theta/2)}.$$

Вираз  $2\pi \sin \theta d\theta$  дає тілесний кут  $d\Omega$ , у межах якого знаходяться напрями, що відповідають кутам розсіювання від  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ . Тому можна написати

$$\boxed{\frac{dN_\theta}{N} = na \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v^2}^2 \frac{d\Omega}{4\sin^4(\theta/2)}}. \quad (1.6)$$

Ми отримали **формулу Резерфорда** для розсіювання  $\alpha$ -частинок. У 1913 р. співробітники Резерфорда зробили перевірку цієї формули шляхом підрахунку точок світіння на екрані, що спостерігалися під різними кутами  $\theta$  за однакові проміжки часу. В умовах досліду (див. рис. 1.1) враховувалися  $\alpha$ -частинки, які перебували в межах одного і того самого тілесного кута (який визначається відношенням площі екрана  $E$  до квадрата відстані його від фольги), тому число точок світіння, що спостерігалися під різними кутами, повинне було бути, відповідно до формули Резерфорда, пропорційно  $1/(\sin(\theta/2))^4$ . Цей результат теорії добре підтвердився на досліді. Залежність розсіювання від товщини фольги й швидкості  $\alpha$ -частинок також виявилася узгодженою з формулою (1.6).

Справедливість теорії, що впливає із кулонівської взаємодії між  $\alpha$ -частинкою і ядром атома, свідчить про те, що  $\alpha$ -частинка, яка відбивається у зворотному напрямку, не проникає в область додатного заряду атома. Разом з тим  $\alpha$ -частинка, що летить точно у напрямку ядра, підійшла б до його центра на відстань, яку можна визначити, прирівнявши кінетичну енергію  $\alpha$ -частинки до потенціальної енергії взаємодії  $\alpha$ -частинки з ядром у момент повної зупинки частинки

$$\frac{m_\alpha v^2}{2} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\min}}$$

( $r_{\min}$  – мінімальна відстань між центрами  $\alpha$ -частинки і ядра). Поклавши  $Z = 47$  (срібло),  $v = 10^7$  м/с і  $m_\alpha = 6,6 \cdot 10^{-27}$  кг, отримаємо

$$r_{\min} = \frac{4Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v^2} \approx 6 \cdot 10^{-14} \text{ м.}$$

**4 Проблема стабільності атома з точки зору ядерної моделі атома.** Отже, результати дослідів з розсіювання  $\alpha$ -частинок свідчать на користь запропонованої Резерфордом ядерної моделі атома. Однак ядерна модель виявилася суперечливою відносно законів класичної механіки й електродинаміки. Оскільки система нерухомих зарядів не може перебувати в стійкому стані, то Резерфорду довелося відмовитися від статичної моделі атома

й припустити, що електрони рухаються навколо ядра, описуючи викривленні траєкторії. Але в цьому випадку електрон буде рухатися із прискоренням, у зв'язку із чим відповідно до класичної електродинаміки він повинен безперервно випромінювати електромагнітні (світлові) хвилі. Процес випромінювання супроводжується втратою енергії, так що електрон повинен в остаточному підсумку впасти на ядро.

## § 2 Постулати Бора. Правило квантування орбіт. Досліди Франка й Герца

**1 Постулати Бора. Правило квантування орбіт.** У попередньому параграфі було з'ясовано, що ядерна модель атома з точки зору класичної механіки й електродинаміки виявилася нездатною пояснити стійкість атома. Вихід з цього утруднення був знайдений в 1913 р. датським фізиком Нільсом Бором, щоправда, ціною введення припущень, що суперечать класичним уявленням. Припущення, запропоновані Бором, містяться у двох сформульованих ним постулатах (**постулати Бора**).

1) *Атом (і будь-яка атомна система) може перебувати не у всіх станах, що допускаються класичною механікою, а тільки в деяких вибраних (квантових) станах, що характеризуються певними перервними, дискретними значеннями енергії  $E_1, E_2, E_3, \dots$ . У цих станах, всупереч класичній електродинаміці, атом не випромінює. Тому вони називаються стаціонарними станами.*

2) *Випромінювання випускається або поглинається у вигляді світлового кванта енергії  $\hbar\omega$  при переході електрона з одного стаціонарного стану в інший. Величина світлового кванта дорівнює різниці енергій стаціонарних станів, між якими відбувається квантовий перехід електрона:*

$$\hbar\omega = E_n - E_m. \quad (2.1)$$

Які ж орбіти потрібно вважати стаціонарними? На це питання відповідає **правило квантування орбіт**: у стаціонарному стані атома електрон, рухаючись по орбіті, повинен мати дискретні, квантовані значення моменту імпульсу:

$$L = m_e v r = n \hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.2)$$

Тут  $m_e$  – маса електрона;  $v$  – його швидкість;  $r$  – радіус кругової орбіти;  $n$  – ціле число, що з часом отримало назву головного квантового числа. Правило квантування орбіт Бор отримав, виходячи з гіпотези Планка, відповідно до якої реалізуються тільки такі стани гармонічної коливальної системи (гармонічного осцилятора), енергія яких дорівнює  $n\hbar\omega'$ , де  $\omega'$  – частота коливальної системи. Отримане правило для гармонічного осцилятора Бор поширив і на інші механічні системи.

Постулати Бора стали обґрунтуванням планетарної (ядерної) моделі атома, пояснили ряд експериментів.

**2 Досліди Франка й Герца.** Існування дискретних енергетичних рівнів атома підтверджується дослідями, виконаними в 1914 р. Франком і Герцем. Схема їх установки наведена на рис. 2.1. У трубці, яка заповнена парами ртуті під невеликим тиском ( $\sim 1$  мм рт. ст.), знаходяться три електроди: катод  $K$ , сітка  $C$  й анод  $A$ . Електрони, що вилітають з катода внаслідок термоелектронної емісії, прискорюються різницею потенціалів  $U$ , яка прикладена між катодом і сіткою. Цю різницю потенціалів

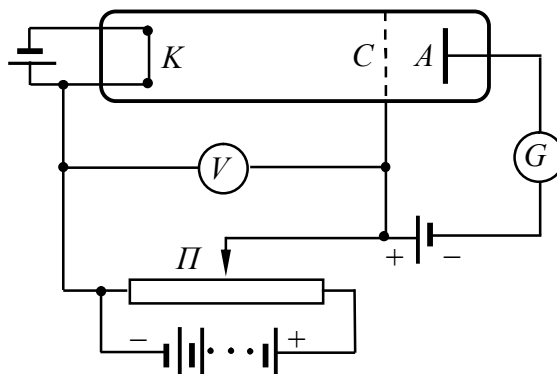


Рисунок 2.1

можна плавно змінювати за допомогою потенціометра  $\Pi$ . Між сіткою й анодом створювалося слабе електричне поле (різниця потенціалів порядку 0,5 В), яке гальмувало рух електронів до анода. На рис. 2.2 показана зміна потенціальної енергії електрона

$E_p = -e\phi$  у зазорі між електродами при різних значеннях напруги  $U$  між катодом і сіткою ( $\phi$  – потенціал, у відповідній точці поля).

Досліджувався струм  $I$  в колі анода залежно від напруги  $U$  між катодом і сіткою. Сила струму вимірялася гальванометром  $G$ , напруга – вольтметром  $V$ . Отримані результати подані на рис. 2.3. Бачимо, що сила струму спочатку монотонно зростала, досягаючи максимуму при  $U = 4,9$  В, після чого з подальшим збільшенням  $U$  різко спадала, досягаючи мінімуму, і знову починала зростати. Максимуми сили струму повторювалися при напрузі  $U$ , що дорівнювала 9,8 В, 14,7 В і т.д.

Такий хід кривої пояснюється тим, що внаслідок дискретності енергетичних рівнів атоми можуть поглинати енергію тільки порціями:

$$\Delta E_1 = E_2 - E_1 \text{ або } \Delta E_2 = E_3 - E_1 \text{ і так далі,}$$

де  $E_1, E_2, E_3, \dots$  – енергія 1-го, 2-го й т.д. стаціонарних станів.

Поки енергія електрона менша за  $\Delta E_1$ , зіткнення між електроном і атомом ртуті мають пружний характер, причому оскільки маса електрона набагато менша від маси атома ртуті, енергія електрона при зіткненнях практично не змінюється. Частина електронів попадає на сітку, інші ж, проскочивши через сітку, досягають анода, створюючи струм у колі гальванометра  $G$ . Чим більша швидкість, з якої електрони досягають сітки (чим більше  $U$ ), тим більше буде електронів, які проскочили через сітку, і, отже, тим більшою буде сила струму  $I$ .

Коли енергія, що отримується електроном у проміжку катод-сітка, досягає значення  $\Delta E_1$ , зіткнення перестають бути пружними – електрони при ударах об атоми передають їм енергію  $\Delta E_1$  й продовжують потім рухатися з меншою швидкістю. Тому число електронів, що досягають анода, зменшується. Наприклад, при  $U = 5,3$  В електрон передає атому енергію, що відповідає 4,9 В (перший потенціал збудження атома ртуті), і продовжує рухатися з енергією 0,4 еВ. Якщо навіть такий електрон з'явиться між сіткою й анодом, він не зможе перебороти затримуючу напругу 0,5 В і буде повернутий назад на сітку.

Атоми, що отримали при зіткненні з електронами енергію  $\Delta E_1$ , переходять у збуджений стан, з якого вони через час порядку  $10^{-8}$  с повертаються в основний стан, випромінюючи фотон із частотою  $\omega = \Delta E_1 / \hbar$ .

При напрузі, що перевищує 9,8 В, електрон на шляху катод-анод може двічі перетерпіти непружне зіткнення з атомами ртуті, втрачаючи при цьому енергію 9,8 еВ, внаслідок чого сила струму  $I$  знову почне зменшуватися. При ще більшій напрузі можливі трикратні непружні зіткнення електронів з атомами, що приводить до виникнення максимуму при  $U = 14,7$  В, і т.д.

При достатньому розрідженні парів ртуті й відповідній величині прискорювальної напруги електрони за час до зіткнення з атомами можуть отримати швидкість, достатню для переведення атома у стан з енергією  $E_3$ . У цьому випадку на кривій  $I = f(U)$  будуть спостерігатися максимуми при напругах, кратних другому потенціалу збудження атома (для ртуті цей потенціал дорівнює 6,7 В), або при напругах, що дорівнюють сумі першого й другого потенціалів збудження і т.д.

Таким чином, у дослідах Франка й Герца безпосередньо спостерігається існування в атомів дискретних енергетичних рівнів.

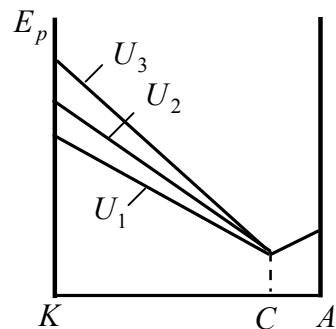


Рисунок 2.2

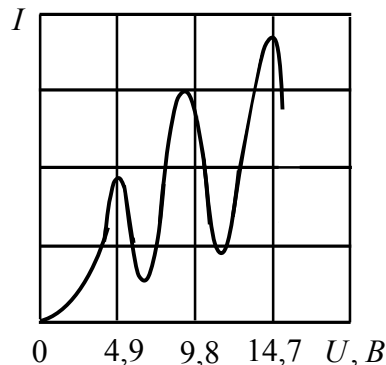


Рисунок 2.3

### § 3 Спектральні закономірності у випромінюванні атома водню. Терми. Комбінаційний принцип Рітца

1 Випромінювання незв'язаних один з одним атомів складається з відокремлених спектральних ліній. Відповідно до цього спектр випромінювання атомів називається **лінійчастим**.

Вивчення атомних спектрів стало ключем до пізнання будови атомів. Насамперед було помічено, що лінії в спектрах атомів розміщені не безсистемно, а поєднуються в групи або, як їх називають, **серії ліній**. Краще всього це проявляється в спектрі найпростішого атома – водню. На рис. 3.1 подана частина спектра атомарного водню у видимій і близькій ультрафіолетовій області. Символами  $H_\alpha$ ,  $H_\beta$ ,  $H_\gamma$  і  $H_\delta$  позначені видимі лінії.  $H_\infty$  вказує межу серії (див. нижче). Очевидно, що лінії розміщені у певному порядку. Відстань між лініями закономірно зменшується при переході від більш довгих хвиль до більш коротких.

Швейцарський фізик Бальмер (1885) виявив, що довжини хвиль цієї серії ліній водню можуть бути точно подані формулою

$$\omega = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots), \quad (3.1)$$

де  $n$  – ціле число, що набуває значень 3, 4, 5 і т.д.;  $R$  – константа, названа на честь шведського спектроскопіста **сталою Рідберга**<sup>1</sup>. Вона дорівнює

$$R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ c}^{-1}. \quad (3.2)$$

Формула (3.1) називається **формулою Бальмера**<sup>1</sup>, а відповідна серія спектральних ліній водневого атома – **серією Бальмера**. Подальші дослідження показали, що у спектрі водню є ще кілька серій. В ультрафіолетовій частині спектра знаходиться серія Лаймана. Інші серії лежать в інфрачервоній області. Лінії цих серій можуть бути подані у вигляді формул, аналогічних до (3.2):

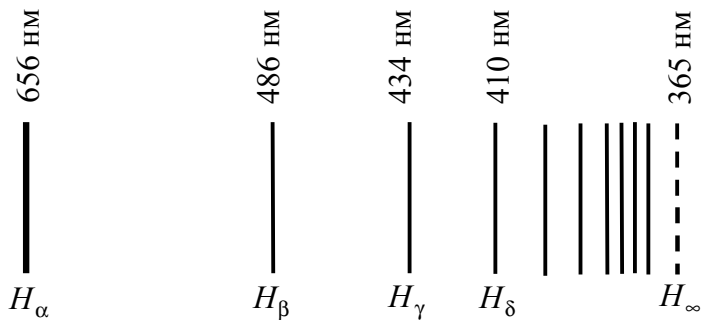


Рисунок 3.1

$$\text{серія Лаймана} \quad \omega = R \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \quad (n = 2, 3, 4, \dots),$$

$$\text{серія Пашена} \quad \omega = R \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \quad (n = 4, 5, 6, \dots),$$

$$\text{серія Брекета} \quad \omega = R \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \quad (n = 5, 6, 7, \dots),$$

<sup>1</sup> У спектроскопії спектральні лінії характеризують не частотою, а величиною, яка обернена до довжини хвилі

$$1/\lambda = \omega/(2\pi c).$$

Формула Бальмера, що написана для цієї величини, має такий самий вигляд, як (3.1):

$$\frac{1}{\lambda} = R' \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \quad (n = 3, 4, 5, \dots).$$

Стала Рідберга набуває у цьому випадку значення  $R' = 10973731,77 \pm 0,83 \text{ м}^{-1}$ .

$$\text{серія Пфунда } \omega = R \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \quad (n = 6, 7, 8, \dots).$$

Частоти усіх ліній спектра водневого атома можна подати однією формулою

$$\omega = R \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}, \quad (3.3)$$

де  $m$  має значення 1 для серії Лаймана, 2 – для серії Бальмера і т.д. Для заданого  $m$  число  $n$  набуває всіх цілих значень, починаючи з  $m+1$ . Вираз (3.3) називають **узагальненою формулою Бальмера**.

При зростанні  $n$  частота лінії в кожній серії прямує до граничного значення  $R/m^2$ , яке називається **межею серії** (на рис. 3.1 символом  $H_\infty$  позначена межа серії Бальмера).

2 Візьмемо ряд значень виразів  $T(n) = R/n^2$ :

$$\frac{R}{1^2}, \frac{R}{2^2}, \frac{R}{3^2}, \dots \quad (3.4)$$

Частота будь-якої лінії спектра водню може бути подана у вигляді різниці двох чисел ряду (3.4). Ці числа називають **спектральними термами**, або просто **термами**. Так, наприклад, частота першої лінії серії Бальмера дорівнює  $T(2) - T(3)$ , другої лінії серії Пфунда  $T(5) - T(7)$  і т.д.

Вивчення спектрів інших атомів показало, що частоти ліній і в цьому випадку можуть бути подані у вигляді різниці двох термів:

$$\omega = T_1(m) - T_2(n). \quad (3.5)$$

Формула (3.5) виражає основний закон спектроскопії, встановлений емпірично в 1908 р., який називається **комбінаційним принципом Рітца**. *Принцип Рітца полягає у тому, що все різноманіття спектральних ліній атома може бути отримане шляхом попарних комбінацій набагато меншого числа величин, які називаються спектральними термами.* Частота кожної спектральної лінії дорівнює різниці двох термів (3.5). Однак терм  $T(n)$  для інших атомів звичайно має більш складний вигляд, ніж для водневого атома. Крім того, перший і другий члени формули (3.5) беруться з різних рядів термів.

#### § 4 Борівська теорія воднеподібного атома. Узагальнена формула Бальмера. Стала Рідберга. Недоліки теорії Бора

1 Використовуючи постулати (Бора), умови квантування орбіт та деякі закони класичної механіки, Бор створив напівкласичну теорію воднеподібного атома. Розглянемо детально цю теорію.

Відповідно до моделі атома Резерфорда електрон у воднеподібному атомі рухається в полі атомного ядра із зарядом  $Ze$  по колу під дією сили Кулона. При  $Z=1$  така система відповідає атому водню, при інших  $Z$  – воднеподібному іону, тобто атому з порядковим номером  $Z$ , у якого вилучені всі електрони, крім одного. В атомі електрон під дією сили Кулона рухається по коловій орбіті радіуса  $r$  зі швидкістю  $v$  з доцентровим прискоренням  $a_{\text{доц}} = v^2/r$ . Рівняння другого закону Ньютона для електрона в цьому випадку має вигляд

$$m_e a_{\text{доц}} = F_K, \text{ або } m_e \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (4.1)$$

Також згідно з першим постулатом Бора електрон може рухатися тільки по стаціонарних орбітах, для яких момент імпульсу електрона  $L = m_e v r$  відповідно до правила квантування орбіт задовольняє умову:

$$m_e v r = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (4.2)$$

Число  $n$  у виразі (4.1) називається *головним квантовим числом*, де  $m_e$  – маса електрона;  $v$  – його швидкість;  $r$  – радіус орбіти;  $\hbar$  – стала Планка.

Система рівнянь (4.1) (4.2) повністю описує поведінку електрона у воднеподібному атомі.

Виключивши швидкість  $v$  із рівнянь (4.1) і (4.2), отримаємо вираз для радіусів стаціонарних орбіт:

$$r \equiv r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e Ze^2} n^2 \quad (n=1,2,3,\dots). \quad (4.3)$$

Радіус першої орбіти ( $n=1$ ) атома водню ( $Z=1$ ) називається *борівським радіусом*. Його значення дорівнює

$$r_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (4.4)$$

Відзначимо, що борівський радіус має порядок значення газокінетичних розмірів атома.

Внутрішня енергія атома складається з кінетичної енергії електрона (ядро є нерухомим) і енергії електростатичної взаємодії електрона з ядром:

$$E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}.$$

З (79.1) випливає, що

$$\frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}.$$

Отже,

$$E = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}.$$

Підставивши сюди вираз (79.3) для  $r$ , знайдемо значення енергії атома на стаціонарних орбітах:

$$E \equiv E_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (n=1,2,3,\dots). \quad (4.5)$$

Як бачимо, повна енергія воднеподібного атома визначається числом  $n$ . Саме тому число  $n$  отримало назву *головного квантового числа*.

При переході атома водню ( $Z=1$ ) зі стану  $n$  в стан  $m$  випромінюється фотон, енергія якого визначається другим постулатом Бора

$$\hbar\omega = E_n - E_m = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Частота випромінюваного світла дорівнює

$$\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e e^4}{2\hbar^3} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

Ми прийшли до узагальненої формули Бальмера, причому для сталої Рідберга отримали значення

$$R = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e e^4}{2\hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}. \quad (4.6)$$

Як бачимо, при підстановці у вираз (79.6) числових значень  $m_e$ ,  $e$  і  $\hbar$  отримуємо величину, що дуже добре узгоджується з експериментальним значенням сталої Рідберга.

**2** Теорія Бора була великим кроком у розвитку теорії атома. Вона пояснила ряд експериментальних фактів, стала потужним стимулом для проведення багатьох експериментальних досліджень, які принесли важливі результати. Навіть у тих випадках (а таких випадків була більшість), коли теорія не могла кількісно пояснити багато явищ, два постулати Бора були керівною ниткою при класифікації і якісній інтерпретації цих явищ. На їх основі, наприклад, був класифікований величезний емпіричний матеріал атомної й молекулярної спектроскопії.

Після перших успіхів теорії Бора усе чіткіше проявлялися її недоліки. Особливо тяжкою була невдача при побудові теорії атома гелію – одного з найпростіших атомів після атома водню.

Самою слабкою стороною теорії Бора була її внутрішня логічна суперечливість: вона не була ні послідовно класичною, ні послідовно квантовою теорією. Після відкриття хвильових властивостей речовини стало зрозуміло, що теорія Бора, яка опирається на класичну механіку, є перехідним етапом на шляху до створення послідовної квантової теорії атомних явищ.

## ТЕМА 2 ХВИЛЬОВІ ВЛАСТИВОСТІ МІКРОЧАСТИНОК

### § 5 Гіпотеза де Бройля. Довжина хвилі де Бройля для електрона, що вільно рухається

**1** У результаті поширення уявлень про природу світла з'ясувалося, що світло виявляє корпускулярно хвильовий дуалізм (подвійність). В одних явищах проявляється його хвильова природа, і він веде себе як електромагнітна хвиля (інтерференція, дифракція), в інших явищах проявляється корпускулярна природа світла, і він веде себе як потік фотонів (фотоэффект, явище Комптона).

У 1924 р. **де Бройль висунув сміливу гіпотезу, що дуалізм не є особливістю тільки світла. Він припустив, що і частинки речовини поряд з корпускулярними властивостями мають також і хвильові (корпускулярно-хвильовий дуалізм частинок). Де Бройль переніс на частинки речовини такі самі правила переходу від корпускулярних характеристик до хвильових, які є справедливими у випадку світла.**

Так відомо, що фотон світла має енергію

$$E = \hbar\omega \quad (5.1)$$

й імпульс

$$p = 2\pi\hbar/\lambda, \quad (5.2)$$

які пов'язані з частотою  $\omega$  та довжиною  $\lambda$  світлової хвилі.

За гіпотезою де Бройля рух будь-якої частинки пов'язаний із хвильовим процесом, довжина хвилі визначається аналогічно до (5.2)

$$\boxed{\lambda = 2\pi\hbar / p} \quad (5.3)$$

а частота – аналогічно до (5.1)

$$\boxed{\omega = E / \hbar}. \quad (5.4)$$

**Формули (5.3) та (5.4) визначають довжину та частоту хвилі де Бройля (хвилі, що відповідає частинці речовини).**

**2** Все викладене вище є гіпотетичним і тому не має доказової сили. Точним доведенням або спростуванням отриманих результатів може бути тільки дослід. У яких саме явищах природи можуть виявитися хвильові властивості речовини, якщо вони дійсно існують? Незалежно від фізичної природи хвиль до таких явищ відносять інтерференцію й дифракцію. Безпосередньо величиною, яка тут досліджується, є довжина хвилі  $\lambda$ . У всіх випадках довжини хвиль де Бройля визначаються формулою (5.3). Застосуємо її до



нерелятивістського руху частинок. Для електронів з масою  $m_e$ , які прискорені різницею потенціалів  $U$ , імпульс визначається із закону збереження енергії

$$\frac{p^2}{2m_e} = \frac{m_e v^2}{2} = eU,$$

тобто

$$p = \sqrt{2eUm_e}. \quad (5.5)$$

Тоді з (5.3) отримаємо

$$\lambda = 2\pi\hbar / \sqrt{2eUm_e}. \quad (5.6)$$

Визначимо довжину хвилі де Бройля для електронів, які прискорені напругою від 100 В до 10 кВ. Підставивши у співвідношення (5.6) відповідні числа, отримаємо, що довжина хвилі де Бройля такого електрона змінюється від 0,39 нм до 0,012 нм, тобто відповідає рентгенівському діапазону.

Таким чином, довжина хвилі де Бройля для електронів, які прискорені напругою від 100 В до 10 кВ, мають такий самий порядок, що й довжини хвиль рентгенівських променів. Тому дифракцію таких електронів потрібно намагатися шукати методами, аналогічними до тих, які застосовуються у випадку рентгенівських променів. Однак гіпотеза де Бройля уявлялась настільки фантастичною, що порівняно довго ніхто з експериментаторів не намагався піддати її експериментальній перевірці.

## § 6 Досліди Девісона й Джермера. Досліди Томсона й Тартаковського

Гіпотеза де Бройля була підтверджена експериментально в дослідах Девісона й Джермера, а також Томсона (1927) та Тартаковського.

Девісон і Джермер досліджували в 1927 р. відбиття електронів від монокристала нікелю, що належить до кубічної системи. Вузький пучок моноенергетичних електронів спрямовувався на поверхню монокристала, який був відшліфований перпендикулярно до великої діагоналі кристалічної комірки. Відбиті електрони вловлювалися циліндричним електродом, який був приєднаним до гальванометра (рис. 6.1). Інтенсивність відбитого пучка оцінювалася за силою електричного струму, що проходить через гальванометр. Змінювалися швидкість електронів і кут  $\phi$ . На рис. 6.2 показана залежність сили струму, яка вимірювалася гальванометром, від кута  $\phi$  при різних енергіях електронів.

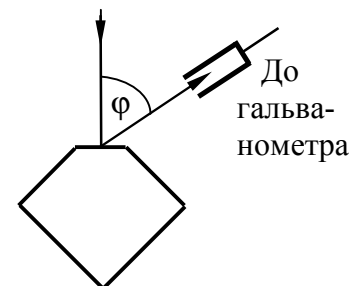


Рисунок 6.1

Вертикальна вісь на графіках визначає напрям електронного пучка, що падає на монокристал. Сила струму в заданому напрямку відображається довжиною відрізка, який проведено від початку координат до точки перетину з кривою. З рисунка бачимо, що розсіювання виявилось особливо інтенсивним при певному значенні кута  $\phi$ . Цей кут відповідав відбиттю від атомних площин, відстань  $d$  між якими була відома з рентгенографічних досліджень. При даному  $\phi$  сила струму виявилася особливо значною при прискорювальній напрузі, яка дорівнювала 54 В. Обчислена за формулою де Бройля довжина хвилі електрона

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}, \quad (6.1)$$

яка відповідає цій напрузі, дорівнює 0,167 нм. Брегівська довжина хвилі, що відповідає умові<sup>2</sup> (див. питання «Дифракція на просторових структурах. Закон Вульфа-Брегга»)

$$2d \sin \theta = m\lambda$$

дорівнювала 0,165 нм. Збіг цих довжин хвиль настільки вражаючий, що досліди Девісона й Джермера визнано блискучим підтвердженням ідеї де Бройля.

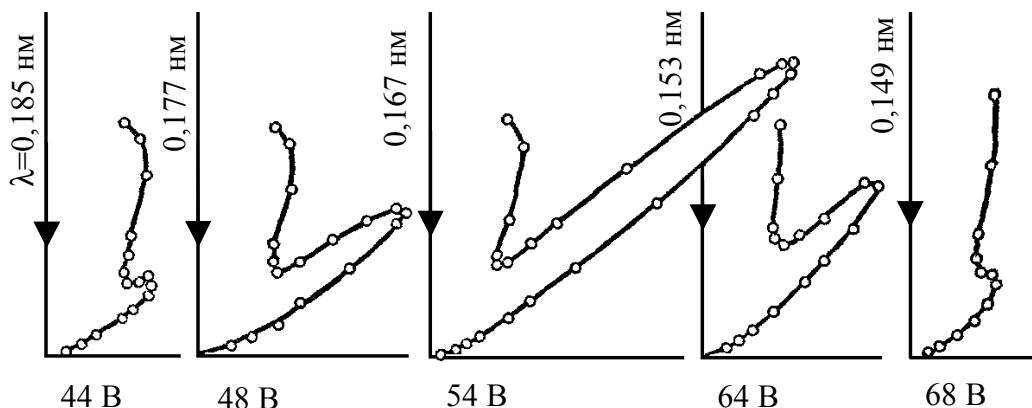


Рисунок 6.2

2 Г.П.Томсон (1927) і незалежно від нього П.С.Тартаковський отримали дифракційну картину при проходженні електронного пучка через металеву фольгу. Схема досліду подана на рис. 81.3. Пучок електронів, прискорений різницею потенціалів порядку декількох десятків кіловольт, проходив через тонку металеву фольгу й попадав на фотопластинку. Електрон при ударі об фотопластинку відіграє таку саму роль, як і фотон. Отримана таким способом електронограма золота (рис. 6.4а) подібна до рентгенограми алюмінію (рис. 6.4б), яка отримана в аналогічних умовах. Подібність обох картин вражає. Штерн і його співробітники показали, що дифракційні явища мають місце також і для атомних та молекулярних пучків. У всіх перелічених випадках дифракційна картина відповідає довжині хвилі, яка визначається співвідношенням (6.1).

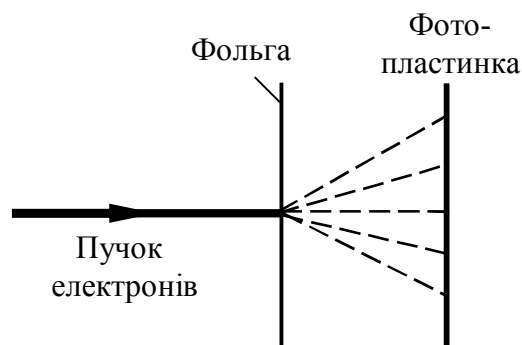
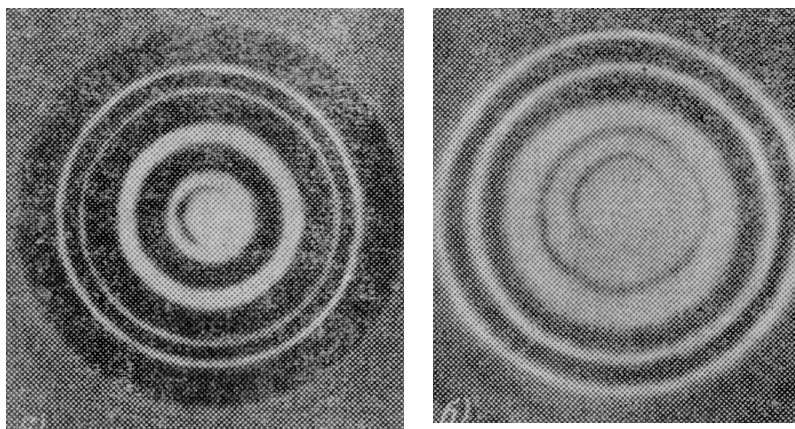


Рисунок 6.3



а

б

Рисунок 6.4

<sup>2</sup> Кут ковзання  $\theta$  пов'язаний з кутом  $\varphi$  співвідношенням  $\theta = \frac{\pi}{2} - \frac{\varphi}{2}$ .

## § 7 Статистична інтерпретація хвиль де Бройля

Який же фізичний зміст хвиль де Бройля і який їх зв'язок із частинками речовини? Об'єкти мікросвіту є частинками, чи хвилями?

1 *Одна з хибних гіпотез*, за допомогою якої Шредінгер спробував відповісти на це питання, а потім швидко відмовився від неї, полягає у такому. Ніякого дуалізму хвиль і частинок у дійсності не існує. Існують тільки хвилі. Частинки ж є суперпозицією хвиль. Справа в тому, що через математичну теорему Фур'є із хвиль різних частот і напрямків завжди можна скласти *хвильовий пакет*, тобто таке хвильове утворення, що при накладенні в певний момент часу хвилі будуть підсилювати одна одну в деякій малій області простору, а поза цією областю відбудеться їх повне гасіння. *Такий хвильовий пакет і є частинка*. Інтенсивність хвиль де Бройля розглядається тут як величина, яка пропорційна густині середовища, з якої утворюється частинка. Здавалося, що підтвердженням такої точки зору є та обставина, що центр хвильового пакета, подібно до центра групи хвиль, повинен у вакуумі поширюватися із груповою швидкістю. А групова швидкість хвиль де Бройля і дорівнює швидкості частинки. Однак хвильовий пакет не може поводитися як частинка тривалий час. Причиною цього є те, що навіть у вакуумі хвилі де Бройля мають *дисперсію*. Внаслідок дисперсії такий хвильовий пакет буде еволюціонувати в часі. Монохроматичні хвилі різних частот, з яких утворений пакет, будуть розходитися з різними фазовими швидкостями. Це призведе до деформації, розпливання і зрештою до *розпаду* первісного хвильового пакета. Таким чином, частинка, якщо вона була хвильовим утворенням, була б нестійкою й швидко розпадалася б. Це жодною мірою не відповідає дійсності. **Таким чином, частинка не може бути хвильовим пакетом, утвореним із хвиль де Бройля.**

2 *Не можна прийняти й протилежну точку зору: первинними є частинки, а хвилі представляють їхні утворення, тобто виникають у середовищі, що складається із частинок, подібних до звуку, що поширюється у повітрі.* Дійсно, таке середовище повинно бути досить щільним, тому що про хвилі в середовищі частинок має сенс говорити лише тоді, коли середня відстань між частинками є дуже малою у порівнянні з довжиною хвилі. А в типових випадках для хвиль де Бройля ця умова не виконується. Але якщо б навіть ми перебороли це утруднення, то все-таки зазначена точка зору повинна бути відкинута. Насправді вона означає, що *хвильові властивості притаманні системам багатьох часток, а не окремим частинкам*. Тим часом хвильові, інтерференційні властивості часток не зникають і при малих інтенсивностях падаючих пучків. Це було доведено прямими дослідями Бібермана, Сушкіна й Фабриканта з електронами. У дослідях Бібермана, Сушкіна й Фабриканта застосовувалися настільки слабкі пучки електронів, що середній проміжок часу між двома послідовними проходженнями електрона через дифракційну систему був приблизно в 30 000 разів більше часу, яке витрачається одним електроном на проходження всього приладу. За таких умов взаємодія між електронами, звичайно, не відіграла ніякої ролі. Тим часом при досить тривалій експозиції виникала дифракційна картина, яка нічим не відрізнялася від картини, що отримували при короткій експозиції з пучками електронів, інтенсивність яких була приблизно у  $10^7$  разів більше. Важливим є те, що в обох випадках загальне число електронів, які потрапили на фотопластинку, було однакове. Це показує, що **й окремі частинки мають хвильові властивості**. Побічним доказом цього є також те, що хвильові властивості мають електрони атомних оболонок, наприклад, єдиний електрон атома водню, і при цьому про середовище, що утворене електронами, говорити не доводиться.

3 Так який же фізичний зміст хвиль де Бройля? Щоб відповісти на вищепоставлене питання, розглянемо такий експеримент. Припустимо, що пучок частинок (для визначеності будемо говорити про електрони) падає на деякий дифракційний пристрій, наприклад кристал. Як показують експерименти, дифракція властива й хвилям де Бройля, що відповідають тільки одній частинці. Тому можна припустити, що у пучок, який падає, складається всього з одного електрона. При проходженні відповідної електронної хвилі де Бройля через кристал вона розбивається на кілька дифракційних пучків. *Не можна припускати, що в кожному з таких пучків знаходиться якась частинка електрона.*

Електрон діє завжди як ціле й ніколи не проявляється частина електрона, – у цьому проявляється атомізм, що властивий мікросвіту. Припустимо, що на шляху одного з дифрагованих пучків поставлений лічильник для вловлювання електронів. Якщо лічильник спрацює, то він завжди виявляє цілий електрон, а аж ніяк не його частину. Із цього не можна зробити висновок, що до виявлення електрон знаходився тільки в одному розглянутому дифрагованому пучку, а тому всі інші дифраговані пучки ніякої ролі не відіграли – їх просто не існувало. Така точка зору означала б, що електрон проходить через експериментальний пристрій як матеріальна точка класичної механіки. *Це є несумісним з явищами інтерференції й дифракції електронів.* Якщо повторити той самий дослід з іншим електроном, то електрон виявиться також в одному з дифрагованих пучків, але в загальному випадку не в тому самому. Подібні труднощі змусили Борна запропонувати **статистичну інтерпретацію хвиль де Бройля**, що дозволяє об'єднати атомізм частинок з їх хвильовими властивостями.

4 Відповідно до статистичної інтерпретації хвилі де Бройля потрібно розглядати як хвилі ймовірності. А саме: **інтенсивність хвилі де Бройля в будь-якому місці простору пропорційна ймовірності виявити частинку в цьому місці.** Але статистичні або ймовірнісні властивості частинок можуть бути встановлені на досліді не з одною частинкою, а лише з *багатьма частинками* або тільки з однією частинкою, якщо дослід за певних умов повторений багаторазово. Говорити про статистику й ймовірність має сенс лише стосовно певної сукупності елементів, до яких ці поняття відносять. Це може бути або сукупність багатьох одночасних елементів, які спостерігаються, або один елемент, який спостерігається у послідовні моменти часу. Такі сукупності елементів у квантовій механіці називаються **квантовими ансамблями**. Квантовий ансамбль, і це є одним з основних положень квантової механіки, реалізується шляхом встановлення деяких макроскопічних параметрів. Це, звичайно, не означає, що хвильові властивості властиві ансамблям частинок, а не самим частинкам. Ансамблї необхідні тільки для виявлення таких властивостей.

5 Як зі статистичної точки зору пояснюється дифракція частинок, наприклад електронів? Перед влученням на дифракційний пристрій електрони проходять певну прискорювальну різницю потенціалів, якій відповідає одне і те саме значення довжини хвилі де Бройля. Прискорювальний потенціал і є тим макроскопічним параметром, що виділяє квантовий ансамбль частинок. Нехай реєстрація електронів виконується за допомогою фотопластинки. У яке місце фотопластинки потрапить індивідуальний електрон, достовірно передбачити неможливо; це можна зробити тільки з тим або іншим ступенем ймовірності. Ймовірність влучення електрона в те або інше місце фотопластинки пропорційне інтенсивності хвилі де Бройля в цьому місці. Окремий електрон залишає на фотопластинці (після її прояву) пляму. Якщо електронів мало, то фотопластинка буде нагадувати мішень, що прострелена невеликою кількістю куль. У розміщенні плям на фотопластинці не виявиться ніякої закономірності. Закономірність буде статистичною, коли на пластинку потрапить дуже багато електронів. У цьому випадку вони переважно потраплять у ті місця фотопластинки, де повинні бути дифракційні максимуми хвиль де Бройля. Сукупність відповідних плям і є дифракційною картиною, що отримується на досліді. Поки електростатичне відштовхування між електронами несуттєве, дифракційна картина буде однією й тією самою незалежно від того, чи утвориться вона електронами, що послідовно проходять по одному через прилад, або відразу інтенсивним пучком однаково прискорених електронів, який складається з такого самого числа частинок.

## § 8 Співвідношення невизначеностей Гейзенберга

1 У класичній механіці стан матеріальної точки в довільний момент часу характеризується її положенням й імпульсом, тобто можна одночасно встановити їх точні значення координат та імпульсу. Для реальних мікрочастинок миттєвий стан не можна

характеризувати точними значеннями їх координат й імпульсу. Причина цього полягає у тому, що будь-яка мікрочастинка має як корпускулярні, так і хвильові властивості.

Не можна сказати, що в певній точці простору довжина хвилі дорівнює  $\lambda$ , якщо про хвильове поле у всіх інших точках простору нічого не відомо. Довжина хвилі є характеристикою синусоїди, а синусоїда – нескінченна періодична крива. Вираз «довжина хвилі в даній точці простору  $x$  дорівнює  $\lambda$ » або «частота хвильового процесу в цей момент часу  $t$  дорівнює  $\omega$ » не мають ніякого змісту – величина  $\lambda$  не є функцією  $x$ , а величина  $\omega$  – функцією  $t$ .

З іншого боку, якщо деяке хвильове утворення займає обмежену область простору, то його завжди можна подати синусоїдами. Тільки однієї синусоїди для цього недостатньо. Необхідний хвильовий пакет – суперпозиція великої кількості синусоїд різних частот, які підсилювалися б у певному інтервалі простору й взаємно гасили б один одного поза цим інтервалом. Якщо довжина хвильового пакета дорівнює  $\Delta x$  (заради простоти ми обмежуємося одним виміром), то хвильові числа  $k$ , які необхідні для його утворення, не можуть займати який завгодно вузький інтервал  $\Delta k$ . Мінімальна ширина інтервалу хвильових чисел хвильового пакета  $\Delta k$ , як доводять математики, повинна приблизно задовольняти співвідношення

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi. \quad (8.1)$$

Це – чисто хвильове співвідношення.

Розглянемо тепер хвильовий пакет із хвиль де Бройля, розміри якого й відповідні межі хвильових чисел задовольняють умову (8.1). Відповідно до статистичної інтерпретації ймовірність виявлення частинки буде відмінна від нуля тільки в межах пакета. А чому буде дорівнювати імпульс частинки? Кожній хвилі де Бройля із хвильовим числом  $k$  відповідає значення імпульсу  $p_x = \hbar k$  (заради простоти ми розглядаємо випадок руху вздовж осі  $X$ ). Певного імпульсу для всього пакета не існує. Існує набір імпульсів, що заповнюють інтервал  $p_x = \hbar k$  до  $p_x + \Delta p_x = \hbar(k + \Delta k)$ . Невідомо, який імпульс буде виявлений у хвильовому пакеті при вимірі. У найкращому разі можна з'ясувати тільки його ймовірність. При вимірі імпульс буде виявлений з тією або іншою ймовірністю між  $p_x = \hbar k$  і  $p_x + \Delta p_x = \hbar(k + \Delta k)$ . Тому, виражаючи  $k$  через  $p_x$ , співвідношення (8.1) можна переписати у вигляді

$$\boxed{\Delta x \Delta p_x \geq 2\pi\hbar = h}. \quad (8.2)$$

Це співвідношення називається **співвідношенням або принципом невизначеностей Гейзенберга для координати й імпульсу частинки**.

Співвідношення Гейзенберга визначає допустиму *принципову межу неточностей*  $\Delta x$  і  $\Delta p_x$ , з якими стан частинки можна характеризувати класично, тобто координатою  $x$  й імпульсом  $p_x$ . Чим точніше  $x$ , тим з меншою точністю можливо характеризувати  $p_x$ , і навпаки. Але співвідношення Гейзенберга жодним чином не можна тлумачити у тому розумінні, що частинка в кожному момент часу має певні значення  $x$  й  $p_x$ , але ми їх принципово не можемо визначити з більшою точністю, чим це дозволяє співвідношення невизначеностей (8.2). Така точка зору зовсім не відповідає природі досліджуваних мікрооб'єктів. *Справжній зміст співвідношення (8.2) відображає той факт, що в природі об'єктивно не існує станів частинок з точно визначеними значеннями обох змінних  $x$  і  $p_x$ .*

Принцип невизначеностей був сформульований Гейзенбергом у 1927 р. і став важливим кроком в інтерпретації закономірностей мікросвіту й побудові квантової механіки.

2 У тривимірному випадку класична частинка характеризується трьома прямокутними координатами  $x, y, z$  й пов'язаними з ними імпульсами  $p_x, p_y, p_z$ . У цьому випадку **співвідношення невизначеностей Гейзенберга** виражаються трьома нерівностями

$$\boxed{\Delta x \Delta p_x \geq h}, \quad \boxed{\Delta y \Delta p_y \geq h}, \quad \boxed{\Delta z \Delta p_z \geq h}. \quad (8.3)$$

Ніяких обмежень на добутки типу  $\Delta x \Delta p_y, \Delta y \Delta p_z$  співвідношення невизначеностей не накладають. Величини  $x$  й  $p_y$ ,  $y$  і  $p_z$  одночасно можуть мати й зовсім точні значення.

3 Разом зі співвідношенням (8.1) у хвильовій теорії виводиться також формула

$$\Delta t \Delta \omega \geq 2\pi. \quad (8.4)$$

Зміст цього співвідношення полягає в тому, що обмежений у часі хвильовий процес не може бути монохроматичним. Якщо процес триває протягом часу  $\Delta t$ , то розкид частот  $\Delta \omega$  хвиль, якими цей процес характеризується, у найкращому разі задовольняє співвідношенню (8.4). Тому якщо для спостереження навіть монохроматичного процесу надано малий час  $\Delta t$ , то частота процесу принципово буде знайдена в найкращому разі з помилкою, що підпорядковується співвідношенню (8.4).

Якщо частоті зіставити енергію за формулою  $E = \hbar \omega$ , то вираз (8.4) перейде в

$$\Delta t \Delta E \geq 2\pi \hbar = h. \quad (8.5)$$

Формула (8.5) називається **співвідношенням невизначеностей Гейзенберга для часу й енергії**.

4 Вимірювання у квантовій області принципово відрізняються від класичних вимірів. Звичайно, і ті й інші вимірювання супроводжуються помилками. Однак класична фізика вважала, що шляхом поліпшення методики й техніки вимірів помилки в принципі можуть бути зроблені як завгодно малими. Навпроти, **відповідно до квантової фізики існує принципова межа точності вимірювань. Вона лежить у природі речей і не може бути зменшена ніяким удосконалюванням приладів і методів вимірювань**. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга й встановлюють одну з таких меж. Взаємодію між макроскопічним вимірювальним приладом і мікрочастинкою під час вимірювання принципово не можна зробити як завгодно малою. Якщо вимірюється, наприклад, координата частинки, то вимірювання неминуче приводить до принципово непереборної неконтрольованої зміни початкового стану частинки, а отже, і до невизначеності в значенні імпульсу при подальшому вимірюванні. Те саме відбувається, якщо порядок вимірювання координати й імпульсу частинки поміняти місцями.

## ТЕМА 3 КВАНТУВАННЯ ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН

### § 9 Хвильова функція. Фізична сутність у-функції. Стандартні умови для хвильової функції

1 Розглянемо частинку, яка рухається вільно у просторі з сталим імпульсом  $p$  уздовж осі  $X$ . Де Бройль припустив, що з такою частинкою пов'язана деяка плоска монохроматична хвиля

$$\xi = A \cos(\omega t - kx),$$

яка поширюється в напрямку тієї самої осі  $X$ . Сутність цієї хвилі спочатку залишалась незрозумілою. Замінивши відповідно до гіпотези де Бройля  $\omega$  й  $\lambda$  через  $E$  і  $p$ , рівняння хвилі де Бройля для вільної частинки запишемо у вигляді

$$\Psi = A \exp[i(\hbar(px - Et))] . \quad (9.1)$$

Функцію  $\Psi$  називають **хвильовою функцією (або псі-функцією)**. Вона описує стан частинки. Функція  $\Psi$ , як правило, буває комплексною й у ряді випадків (коли частинка рухається в силовому полі) має не властивий для хвилі неперіодичний характер. Незважаючи на це, її й у цих випадках називають хвильовою.

2 Правильну інтерпретацію хвильової функції дав у 1926 р. Борн. Згідно з Борном **квадрат модуля хвильової функції визначає ймовірність  $dP$  того, що частинка буде виявлена в межах об'єму  $dV$** :

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV. \quad (9.2)$$

Співвідношення визначає фізичну сутність хвильової функції: квадрат модуля хвильової функції в деякій точці простору є густиною ймовірності знаходження частинки в цій точці простору ( $dP/dV = |\Psi|^2$ ).

Виходячи з фізичного змісту квадрата модуля хвильової функції можемо знайти, що інтеграл від виразу (9.2), узятий в усьому просторі, повинен дорівнювати одиниці:

$$\Psi^* \Psi dV = 1. \quad (9.3)$$

Дійсно, цей інтеграл дає ймовірність того, що частинка знаходиться в одній із точок простору, що є подією достовірною. Відомо, що ймовірність достовірної події дорівнює одиниці. Співвідношення (8.3) називають **умовою нормування**.

З інтерпретації Борна (9.2) випливає, що квадрат модуля хвильової функції є густиною ймовірності (ймовірністю, віднесеною до одиниці об'єму) знаходження частинки у відповідному місці простору. З цього випливають такі властивості хвильової функції. Псі-функція повинна:

- 1) бути однозначною, неперервною й скінченною (за винятком, може бути, особливих точок);
- 2) мати однозначну, неперервну та скінченну похідну;
- 3) інтеграл  $\Psi^* \Psi dV$ , узятий по всьому простору, повинен бути скінченним.

Сукупність перелічених вище вимог називають **стандартними умовами для хвильової функції**.

## § 10 Загальне й стаціонарне рівняння Шредінгера

1 Розвиваючи ідеї де Бройля про хвильові властивості речовини, Шредінгер отримав у 1926 р. рівняння для визначення хвильової функції. Воно дозволяє знайти хвильові функції частинок, які рухаються в різних силових полях. Рівняння виглядає так:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (10.1)$$

Тут  $m$  – маса частинки;  $i$  – уявна одиниця;  $U$  – потенціальна енергія частинки;  $\Delta$  – оператор Лапласа, результат дії якого на деяку функцію є сумою других частинних похідних за координатами:

$$\Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}. \quad (10.2)$$

Рівняння (10.1) називають **загальним рівнянням Шредінгера**. З рівняння (10.1) випливає, що вигляд хвильової функції визначається потенціальною енергією  $U$ , тобто в остаточному підсумку характером сил, що діють на частинку.

**Рівняння Шредінгера є основним рівнянням нерелятивістської квантової механіки. Воно не може бути доведене з інших співвідношень. Його варто розглядати як вихідне основне припущення, справедливості якого доводиться тим, що всі наслідки, які випливають із нього, точно узгоджуються з дослідними фактами.**

Шредінгер установив своє рівняння, виходячи з оптико-механічної аналогії. Ця аналогія полягає в подібності рівнянь, які описують хід світлових променів, з рівняннями, що визначають траєкторії частинок у класичній механіці.

Пояснимо, як можна прийти до загального рівняння Шредінгера. Для простоти обмежимося одновимірним випадком. Розглянемо частинку, яка вільно рухається.

Відповідно до ідеї де Бройля такій частинці потрібно поставити у відповідність плоску хвилю

$$\Psi = A \exp[(i/\hbar)(px - Et)] .$$

Продиференціюємо цю функцію один раз за  $t$ , а інший раз – двічі за  $x$  й отримаємо

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{i}{\hbar}^2 p^2 \Psi .$$

Звідси

$$E = \frac{1}{\Psi} i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad p^2 = -\frac{1}{\Psi} \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} . \quad (10.3)$$

У нерелятивістській класичній механіці енергія  $E$  й імпульс  $p$  вільної частинки пов'язані співвідношенням

$$E = \frac{p^2}{2m} .$$

Підставивши в це співвідношення вираз (85.3) для  $E$  й  $p^2$  і скоротивши потім на  $\Psi$ , отримаємо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} ,$$

яке збігається з рівнянням (10.1), якщо в останньому покласти  $U = 0$ .

У випадку частинки, що рухається в силовому полі, яке характеризується потенціальною енергією  $U$ , енергія  $E$  й імпульс  $p$  пов'язані співвідношенням

$$\frac{p^2}{2m} = E - U .$$

Поширивши й на цей випадок вираз (85.3) для  $E$  й  $p^2$ , отримаємо

$$-\frac{1}{\Psi} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{\Psi} i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - U .$$

Помножимо це співвідношення на  $\Psi$  й перенесемо доданок  $U\Psi$  ліворуч і прийдемо до рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} ,$$

яке збігається з рівнянням (10.1).

Викладені міркування не мають доказової сили й не можуть розглядатися як доведення загального рівняння Шредінгера. Їх мета – пояснити, яким чином можна було прийти до встановлення цього рівняння.

**2** Якщо силове поле, у якому рухається частинка, є стаціонарним (тобто сталим в часі), то функція  $U$  не залежить явно від  $t$ . У цьому випадку розв'язок рівняння Шредінгера розпадається на два множники, один із яких залежить тільки від координат, інший – тільки від часу:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp[-i(E/\hbar)t] . \quad (10.4)$$

Тут  $E$  – повна енергія частинки, яка у випадку стаціонарного поля залишається сталою. Щоб переконатися у справедливості виразу (10.4), підставимо його в рівняння (10.1). У результаті цього отримаємо співвідношення



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \exp[-i(E/\hbar)t] \Delta\psi + U\psi \exp[-i(E/\hbar)t] = i\hbar[-i(E/\hbar)]\psi \exp[-i(E/\hbar)t] .$$

Скоротивши на загальний множник  $\exp[-i(E/\hbar)t]$ , прийдемо до диференціального рівняння, що визначає функцію  $\psi$ :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi = E\psi} . \quad (10.5)$$

Рівняння (10.5) називається **рівнянням Шредінгера для стаціонарних станів (стаціонарне рівняння Шредінгера)**. Надалі ми будемо мати справу тільки із цим рівнянням і для стислості будемо називати його просто рівнянням Шредінгера. Рівняння (85.5) часто пишуть у вигляді

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0 . \quad (10.6)$$

У випадку стаціонарного силового поля хвильова функція має вигляд (85.4). Тоді

$$\Psi^* \Psi = \exp[i(E/\hbar)t] \psi^* \exp[-i(E/\hbar)t] \psi = \psi^* \psi .$$

Таким чином, густина імовірності дорівнює  $\psi^* \psi$  й, отже, від часу не залежить. Саме тому стани, які описуються хвильовими функціями вигляду (10.4), називають стаціонарними.

**3** У класичній механіці стан частинки (матеріальної точки) визначається завданням положення і швидкості (або імпульсу) частинки. Якщо є відомим стан у початковий момент часу й силове поле, у якому знаходиться частинка, то, розв'язавши рівняння Ньютона, можна знайти положення й швидкість частинки у будь-який наступний момент часу. У цьому полягає сутність причинності в класичній механіці.

У квантовій механіці класичне поняття стану позбавлене змісту, тому що координата й швидкість частинки принципово не можуть мати одночасно певних значень. Тому класичне поняття причинності також не можна застосовувати у квантовій теорії. Стан частинки задається у квантовій механіці хвильовою функцією. Якщо відомі хвильова функція в початковий момент часу й силове поле, у якому рухається частинка, то, розв'язавши рівняння Шредінгера, можна знайти хвильову функцію в наступні моменти часу. У цьому полягає сутність причинності у квантовій механіці. Таким чином, квантова механіка не скасувала принцип причинності. Вона лише надала йому форму, яка відповідає дійсній природі речей.

## § 11 Рівняння Шредінгера та квантування енергії

**1** Квантування енергії виникає тому, що на хвильові функції  $\psi$ , які є розв'язками рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi = E\psi , \quad (11.1)$$

накладаються певні обмеження – стандартні умови для хвильової функції. При цих обмеженнях рівняння (86.1) має розв'язки, у загальному випадку, не при всіх, а тільки при вибраних значеннях параметра  $E$  ( $E$  визначає енергію частинки). Тут маємо випадок, аналогічний до того, що має місце в задачі про вільні коливання струни із закріпленими кінцями. Через закріпленість кінців ці коливання є стоячими хвилями з такими вибраними частотами, що на довжині струни вкладається ціле число напівхвиль.

Стандартні умови для хвильової функції, що накладаються на розв'язки рівняння Шредінгера, полягають у тому, що хвильова функція  $\psi(x, y, z)$  і її перші просторові похідні повинні бути скінченними, однозначними й неперервними, інтеграл від  $\psi(x, y, z)$  по усьому

простору повинен бути скінченним. Вибрані значення параметра  $E$ , для яких рівняння Шредінгера має розв'язки, що задовольняють стандартні умови, називаються **власними значеннями** величини  $E$  для диференціального рівняння (86.1), а відповідні їм розв'язки – **власними функціями** того самого рівняння. Власні значення  $E$  і беруть за можливі значення енергії у стаціонарних станах. Власні значення енергії  $E$  можуть бути дискретними, а можуть неперервно заповнювати скінченний або нескінченний інтервал. У першому випадку говорять, що енергетичний спектр *дискретний*, а в другому – *неперервний*.

Таким чином, квантування енергії випливає з основних положень квантової механіки без будь-яких додаткових припущень.

## § 12 Частинка в одновимірній потенціальній ямі. Енергія і хвильова функція частинки в потенціальній ямі

1 У нерелятивістській квантовій механіці основним принципом є рівняння Шредінгера. Пошук розв'язків цього рівняння, які задовольняють стандартні умови, приводить до дискретності енергетичних рівнів. Продемонструємо це на прикладі задачі про частинку, яка знаходиться в одновимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі.

Знайдемо власні значення енергії й відповідні їм власні функції для частинки, що знаходиться в нескінченно глибокій одновимірній потенціальній ямі. Припустимо, що частинка може рухатися тільки уздовж осі  $X$ . Нехай рух обмежений непроникними для частинки стінками з такими координатами:  $x=0$  і  $x=l$ . Потенціальна енергія  $U$  має в цьому випадку такий вигляд (рис. 12.1а): вона дорівнює нулю при  $0 \leq x \leq l$  й перетворюється у нескінченність при  $x < 0$  й  $x > l$ . Для розв'язання задачі використаємо стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (12.1)$$

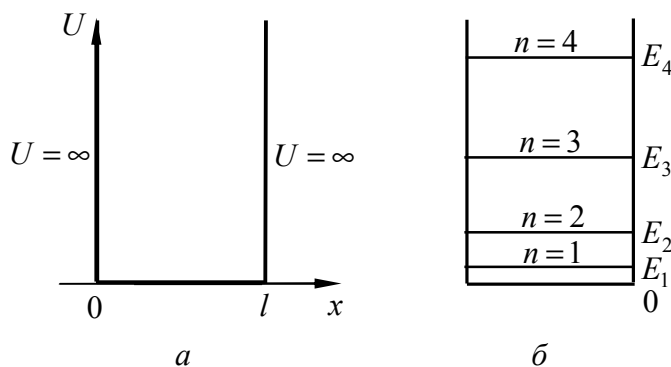


Рисунок 12.1: *a* – нескінченно глибока потенціальна яма; *б* – схема рівнів енергії частинки, що знаходиться в такій ямі

2 Оскільки хвильова функція залежить тільки від координати  $x$ , то рівняння (12.1) спрощується:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (12.2)$$

За межі потенціальної ями частинка потрапити не може (там потенціальна енергія дорівнює нескінченності  $U = \infty$ ). Тому ймовірність виявлення частинки за межами ями дорівнює нулю. Відповідно й функція  $\psi$  за межами ями дорівнює нулю. З умови неперервності випливає, що  $\psi$  повинна дорівнювати нулю й на межах ями, тобто

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \quad (12.3)$$

Це і є одна із стандартних умов, яку повинен задовольняти розв'язок рівняння (12.2). В області, де  $\psi$  не дорівнює тотожно нулю, рівняння (87.2) має вигляд

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (12.4)$$

(у цій області  $U = 0$ ). Увівши позначення

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad (12.5)$$

прийдемо до рівняння

$$\psi'' + k^2 \psi = 0,$$

яке в теорії коливань називають диференціальним рівнянням гармонічних коливань. Розв'язок такого рівняння має вигляд

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha) \quad (12.6)$$

(у цьому випадку зручніше взяти синус замість косинуса). Умови (87.3) можна задовольнити відповідним вибором сталих  $k$  і  $\alpha$ . Насамперед з умови  $\psi(0) = 0$  отримуємо

$$\psi(0) = A \sin \alpha = 0,$$

звідки випливає, що  $\alpha$  повинна дорівнювати нулю. Також повинна виконуватися умова

$$\psi(l) = A \sin(kl) = 0,$$

що можливо лише у випадку, коли

$$kl = \pm n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (12.7)$$

( $n = 0$  не беремо до уваги, оскільки при цьому виходить, що  $\psi = 0$  – частинка у потенціальній ямі відсутня).

Виключивши  $k$  з рівнянь (12.5) і (12.7), знайдемо **власні значення енергії частинки**:

$$E = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (12.8)$$

*Спектр енергії виявився дискретним.* На рис.12.1б зображена схема енергетичних рівнів.

Відповідно до формули (12.8) мінімальна енергія, яку може мати частинка, що знаходиться в потенціальній ямі, відмінна від нуля. Цей результат обумовлений хвильовими властивостями частинки й може бути отриманий зі співвідношення невизначеностей.

**3** Далі знайдемо власну хвильову функцію рівняння Шредінгера. Підставивши в (12.6) значення  $k$ , яке отримали з умови (12.7), знайдемо власні хвильові функції:

$$\psi = \psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{l}$$

(нагадаємо, що  $\alpha = 0$ ). Для знаходження коефіцієнта  $A$  використаємо умову нормування, яку у цьому випадку запишемо так:

$$A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l} dx = 1.$$

Нескладно отримати, що

$$\int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l} dx = \int_0^l \frac{1 - \cos(2n\pi x/l)}{2} dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2n\pi x/l)}{2(2n\pi/l)} \Big|_0^l = \frac{l}{2}.$$

Звідси  $A^2 l/2 = 1$ , або  $A = \sqrt{2/l}$ . Таким чином, **власні функції частинки в потенціальній ямі** мають вигляд

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l} \quad (n=1, 2, 3, \dots). \quad (12.9)$$

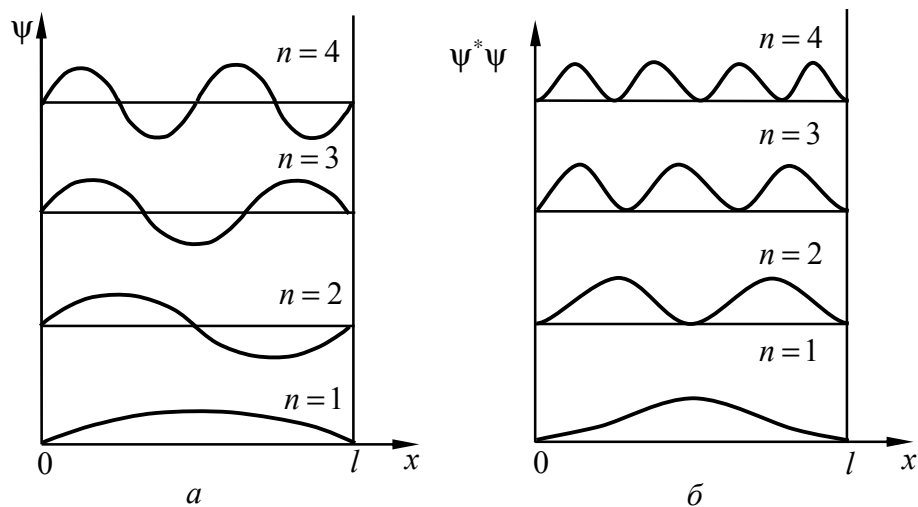


Рисунок 12.2: *а* – графіки власні функції частинки, що знаходиться в потенціальній ямі, яка зображена на рис. 12.1*а*; *б* – густина ймовірності знаходження частинки в точках з різними значеннями координати  $x$

Графіки власних функцій зображені на рис. 12.2*а*. На рис. 12.2*б* подана густина ймовірності виявлення частинки на різних відстанях від стінок ями, що дорівнює  $\psi^* \psi$ . Із графіків, наприклад, випливає, що в стані із  $n=2$  частинка не може бути виявлена всередині ями й разом з цим однаково часто буває як у лівій, так і в правій половині ями. Така поведінка частинки є несумісною з класичними уявленнями про траєкторії. Відзначимо, що відповідно до класичних уявлень усі положення частинки в ямі мають однакову ймовірність.

### § 13 Тунельний ефект. Коефіцієнт проходження

1 Нехай частинка, яка рухається зліва направо, зустрічає на своєму шляху потенціальний бар'єр висотою  $U_0$  й шириною  $l$  (рис. 13.1). За класичними уявленнями частинка повинна вести себе так. Якщо енергія частинки більша за висоту бар'єра ( $E > U_0$ ), частинка безперешкодно проходить над бар'єром (на ділянці  $0 \leq x \leq l$  лише зменшується швидкість частинки, але потім при  $x > l$  знову набуде початкового значення). Якщо ж  $E$  менше  $U_0$  (як зображено на рисунку), то частинка відбивається від бар'єра й летить у зворотній бік; крізь бар'єр частинка проникнути не може.

Зовсім інакше виглядає поведінка частинки з точки зору до квантової механіки. По-перше, навіть при  $E > U_0$  є відмінна від нуля ймовірність того, що частинка відіб'ється від бар'єра й полетить у зворотній бік. По-друге, при  $E < U_0$  є відмінна від нуля ймовірність того, що частинка проникне «крізь» бар'єр і опиниться в області, де  $x > l$ . Така поведінка є цілком неможливою з класичної точки зору. Ця поведінка мікрочастинки впливає безпосередньо з рівняння Шредінгера.

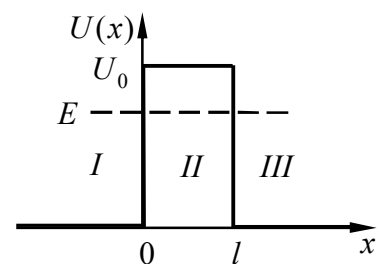


Рисунок 13.1

2 Розглянемо випадок  $E < U_0$ . Рівняння Шредінгера має вигляд

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \quad (13.1)$$

для областей  $I$  і  $III$  й

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi = 0 \quad (13.2)$$

для області  $II$ , причому  $E - U_0 < 0$ .

Будемо шукати розв'язок рівняння (13.1) у вигляді  $\psi = e^{\lambda x}$ . Підстановка цієї функції в (13.1) приводить до характеристичного рівняння

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E = 0.$$

Звідси  $\lambda = \pm i\alpha$ , де

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}. \quad (13.3)$$

Таким чином, загальний розв'язок рівняння (88.1) має вигляд

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x} \text{ для області } I, \\ \psi_3 &= A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x} \text{ для області } III. \end{aligned} \quad (13.4)$$

Вирішивши підстановкою  $\psi = e^{\beta x}$  рівняння (13.2), отримаємо загальний розв'язок цього рівняння у вигляді

$$\psi_2 = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x} \text{ для області } II. \quad (13.5)$$

Тут

$$\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (13.6)$$

Зазначимо, розв'язок вигляду  $e^{i\alpha x}$  відповідає хвилі, яка поширюється в додатному напрямку осі  $X$ , а розв'язок вигляду  $e^{-i\alpha x}$  – хвилі, яка поширюється в протилежному напрямку. Щоб це зрозуміти, згадаємо, що звичайна (звукова, електромагнітна і т.п.) плоска хвиля, яка поширюється в напрямку зростання  $x$ , описується дійсною частиною виразу  $e^{i(\omega t - kx)}$ , а хвиля, яка поширюється в напрямку зменшення  $x$ , – дійсною частиною виразу  $e^{i(\omega t + kx)}$ . Частинці, яка рухається в додатному напрямку осі  $X$ , зіставляється функція  $\Psi = ae^{(i/\hbar)(px - Et)}$ . Якщо відкинути в цій функції часовий множник, то для  $\psi$  отримаємо вираз  $\psi = ae^{i(p/\hbar)x}$ . Для частинки, яка рухається в протилежному напрямку, буде  $\psi = ae^{-i(p/\hbar)x}$ .

В області  $III$  є тільки хвиля, яка пройшла через бар'єр і поширюється зліва направо. Тому коефіцієнт  $B_3$  у виразі (13.4) для  $\psi_3$  потрібно покласти таким, що дорівнює нулю. Для знаходження інших коефіцієнтів скористаємося стандартними умовами, які повинна задовольняти хвильова функція  $\psi$ . Для того щоб  $\psi$  була безперервною у всій області  $x$  від  $-\infty$  до  $+\infty$ , повинні виконуватися умови  $\psi_1(0) = \psi_2(0)$  і  $\psi_2(l) = \psi_3(l)$ . Для того щоб  $\psi$  була гладкою, тобто не мала зломів, повинні виконуватися умови  $\psi'_1(0) = \psi'_2(0)$  і  $\psi'_2(l) = \psi'_3(l)$ . Із цих умов випливають співвідношення:

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ A_2 e^{\beta l} + B_2 e^{-\beta l} &= A_3 e^{i\alpha l}, \\ i\alpha A_1 - i\alpha B_1 &= \beta A_2 - \beta B_2, \end{aligned} \quad (13.7)$$

$$\beta A_2 e^{\beta l} - \beta B_2 e^{-\beta l} = i \alpha A_3 e^{i \alpha l}.$$

Розділимо всі рівняння на  $A_1$  й введемо позначення:

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1}, \quad a_2 = \frac{A_2}{A_1}, \quad b_2 = \frac{B_2}{A_1}, \quad a_3 = \frac{A_3}{A_1},$$

а також

$$n = \frac{\beta}{\alpha} = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}. \quad (13.8)$$

Тоді рівняння (13.7) наберуть вигляду

$$\begin{aligned} 1 + b_1 &= a_2 + b_2, \\ a_2 e^{\beta l} + b_2 e^{-\beta l} &= a_3 e^{i \alpha l}, \\ i - i b_1 &= n a_2 - n b_2, \\ n a_2 e^{\beta l} - n b_2 e^{-\beta l} &= i a_3 e^{i \alpha l}. \end{aligned} \quad (13.9)$$

Відношення квадратів модулів амплітуд відбитої й падаючої хвилі

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |b_1|^2$$

визначає ймовірність відбиття частинки від потенціального бар'єра й називається **коефіцієнтом відбиття**.

Відношення квадратів модулів амплітуд хвилі, що пройшла, й падаючої хвилі

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |a_3|^2 \quad (13.10)$$

визначає ймовірність проходження частинки через бар'єр і називається **коефіцієнтом проходження (або коефіцієнтом прозорості)**.

Нас буде цікавити тільки проходження частинок через бар'єр, і ми обмежимося знаходженням величини  $D$ . Слід зазначити, знайшовши  $D$ , легко знайти  $R$ , оскільки ці коефіцієнти пов'язані очевидним співвідношенням  $R + D = 1$ .

Помножимо перше з рівнянь (13.9) на  $i$  й складемо з третім. У результаті отримаємо

$$2i = (n+i)a_2 - (n-i)b_2. \quad (13.11)$$

Тепер помножимо друге з рівнянь (88.9) на  $i$  й віднімемо його від четвертого. Отримаємо:

$$(n-i)e^{\beta l} a_2 - (n+i)e^{-\beta l} b_2 = 0. \quad (13.12)$$

Вирішивши спільно рівняння (13.11) і (13.12), знайдемо, що

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{2i(n+i)e^{-\beta l}}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}}, \\ b_2 &= \frac{2i(n-i)e^{\beta l}}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}}. \end{aligned}$$

Нарешті, підставивши знайдені нами значення  $a_2$  й  $b_2$  у друге з рівнянь (13.9), отримаємо вираз для  $a_3$ :

$$a_3 = \frac{4ni}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}} e^{-i \alpha l}.$$

Величина

$$\beta l = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} l,$$

як правило, є набагато більшою за одиницю. Тому в знаменнику виразу для  $a_3$  доданком, який містить множник  $e^{-\beta l}$ , можна знехтувати у порівнянні з доданком, який містить множник  $e^{\beta l}$  (комплексні числа  $n+i$  й  $n-i$  мають однаковий модуль). Отже, можна припустити

$$a_3 \approx -\frac{4nie^{-i\alpha l}}{(n-i)^2} e^{-\beta l}.$$

Згідно з (13.10) квадрат модуля цієї величини дає ймовірність проходження частинки через потенціальний бар'єр. Урахувавши, що  $|n-i| = \sqrt{n^2+1}$ , отримаємо

$$D = |a_3|^2 \approx \frac{16n^2}{(n^2+1)^2} e^{-2\beta l},$$

де

$$n^2 = \frac{U_0 - E}{E} = \frac{U_0}{E} - 1$$

(див. формулу (13.8)).

Вираз  $16n^2/(n^2+1)^2$  має величину порядку одиниці. Тому можна вважати, що

$$D \approx e^{-2\beta l} = \exp -\frac{2}{\hbar} l \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (13.13)$$

З отриманого нами виразу випливає, що ймовірність проходження частинки через потенціальний бар'єр істотно залежить від ширини бар'єра  $l$  й від величини  $U_0 - E$ . Якщо при якійсь ширині бар'єра коефіцієнт проходження  $D$  дорівнює, припустимо, 0,01, то при збільшенні ширини у два рази  $D$  буде дорівнювати  $0,01^2 = 0,0001$ , тобто зменшується в 100 разів. Той самий ефект у цьому випадку викликало б зростання в чотири рази величини  $U_0 - E$ . Коефіцієнт проходження різко зменшується при збільшенні маси частинки  $m$ .

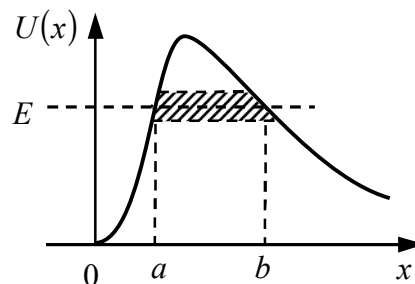


Рисунок 13.2

3 Подібний розрахунок можна виконати у випадку потенціального бар'єра довільної форми (рис. 13.2). У цьому разі формула (13.13) повинна бути замінена більше загальною:

$$D \approx \exp -\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U - E)} dx, \quad (13.14)$$

де  $U = U(x)$ .

При подоланні потенціального бар'єра частинка ніби проходить через «тунель» у цьому бар'єрі (див. заштриховану область на рис. 13.2). У зв'язку з цим розглянуте нами явище називають *тунельним ефектом*.

## § 14 Оператори фізичних величин. Власні функції та власні значення. Принцип суперпозиції

Операторний метод широко використовується у більшості досліджень з квантової механіки. Розглянемо сутність цього методу.

**1 Оператори.** У квантовій механіці кожній фізичній величині ставиться у відповідність оператор. Під **оператором** мається на увазі правило, за допомогою якого одній функції (позначимо її через  $\varphi$ ) зіставляється інша функція (позначимо її через  $f$ ). Символічно це записується так:

$$f = \hat{Q}\varphi. \quad (14.1)$$

Тут  $\hat{Q}$  – позначення оператора. Для того щоб відрізнити оператори від чисел, їх позначають через  $\hat{Q}$ , тобто ставлять кришечку над  $Q$  або використовують інше позначення.

Таким чином, під символом оператора розуміють сукупність дій, за допомогою яких вихідна функція ( $\varphi$ ) перетворюється в іншу функцію ( $f$ ).

Наприклад, символ **оператора Лапласа**  $\Delta = \hat{Q}_1$  позначає дворазове частинне диференціювання за усіма трьома координатами  $x$ ,  $y$  і  $z$  з подальшим підсумовуванням отриманих виразів. Тобто оператор Лапласа можна подати у вигляді

$$\Delta = \hat{Q}_1 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

За допомогою оператора можемо подати множення вихідної функції  $\varphi$  на деяку функцію  $U$ . Тоді наступне перетворення  $f = U \varphi$  можна записати у вигляді  $f = \hat{Q}_2 \varphi$ , де  $\hat{Q}_2 = U$ .

Використовуючи операторний підхід, рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = E \psi \quad (14.2)$$

можна записати в операторному вигляді

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}. \quad (14.3)$$

У цьому рівнянні символом  $\hat{H}$  позначений оператор, який дорівнює

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U. \quad (14.4)$$

Цей оператор називають **гамільтоніаном**, або **оператором Гамільтона**. Гамільтоніан є оператором енергії  $E$ .

**2 Сутність операторного методу.** У квантовій механіці кожній фізичній величині ставиться у відповідність оператор. Розглядаються оператори координат, імпульсу, моменту імпульсу і т.д. Для кожної фізичної величини  $q$  складається рівняння, аналогічне до рівняння Шредінгера в операторному вигляді (14.3). Воно має вигляд

$$\boxed{\hat{Q}\psi = q\psi}, \quad (14.5)$$

де  $\hat{Q}$  – оператор, який ставиться у відповідність фізичній величині  $q$ .

Значення  $q$ , при яких розв'язок рівняння (14.4) задовольняє стандартні умови для хвильової функції, називаються **власними значеннями величини  $q$** , а самі розв'язки – **її власними функціями**. Власні значення величини  $q$  і беруться за можливі значення цієї величини, які спостерігаються в експерименті.

Розглядаючи з цих позицій рівняння Шредінгера (14.3), можемо стверджувати, що воно є рівнянням для власних значень енергії ( $q = E$ ). Оператор енергії визначається співвідношенням (14.4) ( $\hat{Q} = \hat{H}$ ).



**3 Принцип суперпозиції.** Спектр власних значень може бути як дискретним, так і суцільним. У випадку дискретного спектра власні значення й власні функції можна пронумерувати:

$$\begin{aligned} q_1, q_2, \dots, q_n, \dots, \\ \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots \end{aligned} \quad (14.6)$$

За умови дискретного спектра власних значень фізичної величини спостерігаємо дві ситуації. Можливі стани, для яких при вимірюванні деякої величини  $q$  завжди отримуємо однакові значення  $q_n$ . Про такі стани говорять як про стани, у яких *величина  $q$  має певне значення*. Цей стан описується функцією  $\psi_n$ . Однак можливі також стани, для яких при вимірюваннях отримуємо з різною ймовірністю різні власні значення оператора  $\hat{Q}$ . Про такі стани говорять як про стани, у яких *величина  $q$  не має певного значення*.

Хвильова функція стану, у якому  $q$  не має певного значення, є суперпозицією (накладенням) власних функцій величини  $q$ :

$$\boxed{\psi = \sum_n c_n \psi_n}, \quad (14.7)$$

де  $c_n$ , у загальному випадку, є комплексними числами, які не залежать від координат. Кількість доданків у сумі дорівнює числу різних власних функцій величини  $q$ .

Формула (14.7) виражає **принцип суперпозиції хвильових функцій**: *коли хвильові функції  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$  описують деякі стани, то і функція  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n + \dots$  подає деяку хвильову функцію, що описує деякий стан системи*. Обґрунтуванням принципу суперпозиції є узгодженість з дослідом наслідків, які впливають з нього. Так, за допомогою принципу суперпозиції квантова механіка пояснює дифракцію та інтерференцію частинок.

Квадрати модулів коефіцієнтів  $c_n$  дорівнюють імовірності того, що при вимірах, які виконуються над системою, що перебуває у стані  $\psi$ , будуть отримані відповідні значення величини  $q$ . Оскільки сума всіх таких ймовірностей повинна дорівнювати одиниці, коефіцієнти  $c_n$  задовольняють умову

$$\sum_n |c_n|^2 = 1.$$

## § 15 Середні значення фізичних величин з точки зору операторного підходу. Оператори радіуса-вектора, імпульсу, енергії. Зв'язок між власними й середніми значеннями

**1 Як визначають середнє значення фізичної величини в квантовій механіці, використовуючи операторний підхід?** Для відповіді на це питання розглянемо приклад. Припустимо, що багаторазово проводиться вимір координати  $x$  частинки, причому частинка кожного разу перебуває в однакових макроскопічних умовах. Тоді стан частинки в цих дослідах можна характеризувати хвильовою функцією  $\psi(x)$ , яку для спрощення будемо вважати функцією тільки однієї просторової координати  $x$ . Середнє значення координати, яке буде знайдено в результаті вимірів, можна записати у вигляді

$$\langle x \rangle = \int x dP = \int x \psi^* \psi dx = \int \psi^* x \psi dx. \quad (15.1)$$

Тут використано, що  $dP = |\psi|^2 dx = \psi^* \psi dx$  є, виходячи з фізичного змісту квадрата модуля хвильової функції, ймовірністю того, що частинка буде знайдена в інтервалі  $x, x + dx$ .

Використовуючи операторний підхід, вираз для середнього значення  $\langle x \rangle$  записують інакше:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* \hat{x} \psi dx, \quad (15.2)$$

де  $\hat{x}$  оператор величини  $x$ . Порівнюючи вирази (15.1) і (15.2), бачимо, що **оператор  $x$ -ї координати** має вигляд

$$\boxed{\hat{x} = x}. \quad (15.3)$$

Аналогічно можна показати, що **оператори  $y$  й  $z$ -координат** виражаються формулами

$$\boxed{\hat{y} = y}, \quad \boxed{\hat{z} = z}. \quad (15.4)$$

Таким чином, **оператор радіуса-вектора** можна записати в так:

$$\boxed{\hat{\vec{r}} = \vec{e}_x \hat{x} + \vec{e}_y \hat{y} + \vec{e}_z \hat{z} = \vec{e}_x x + \vec{e}_y y + \vec{e}_z z = \vec{r}}. \quad (15.5)$$

Абсолютно так само обчислюється середнє значення довільної функції від координат  $f(x, y, z)$ :

$$\langle f(x, y, z) \rangle = \int \psi^* \hat{f} \psi dx dy dz, \quad (15.6)$$

де оператор функції  $f(x, y, z)$  знаходять так, як і оператор радіуса-вектора (див. (90.5)):

$$\hat{f} = f(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = f(x, y, z). \quad (15.7)$$

Вищевикладений метод знаходження середніх значень поширюють у квантовій механіці на будь-яку фізичну величину (яка залежить не тільки від координат, а й від імпульсів). Для будь-якої фізичної величини  $F(\vec{r}, \vec{p})$  **середнє значення визначається як**

$$\boxed{\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi dV}, \quad (15.9)$$

де  $\hat{F}$  – оператор величини  $F(\vec{r}, \vec{p})$ , який має вигляд

$$\boxed{\hat{F} = F(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})}. \quad (15.10)$$

**2 Знайдемо в явному вигляді оператор імпульсу.**

Як відомо, енергія частинки дорівнює сумі кінетичної та потенціальної енергії і визначається функцією

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + U(x, y, z). \quad (15.11)$$

Використовуючи правило (15.10), енергії (15.11) можна поставити у відповідність оператор

$$\hat{H} = H(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}) = \frac{(\hat{\vec{p}})^2}{2m} + U(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \frac{(\hat{\vec{p}})^2}{2m} + U(x, y, z). \quad (15.12)$$

Порівняємо оператор (15.12) з **оператором Гамільтона (оператор енергії, який визначили з рівняння Шредінгера)**

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z)}. \quad (15.13)$$

З порівняння (15.12) та (15.13) випливає

$$\frac{(\hat{\vec{p}})^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla)^2 \equiv \frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m}.$$

Тут використали зв'язок між оператором Лапласа  $\Delta$  та оператором набла  $\nabla$ :  $\Delta = (\nabla)^2$ . З порівняння знаходимо, що **оператор імпульсу має вигляд**

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla \equiv -i\hbar \left( \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (15.14)$$

Зрозуміло, що оператор енергії визначається співвідношенням (15.13).

**З'ясуємо, як пов'язані між собою середні значення, що визначаються способом (15.9) та власні значення фізичних величин.**

Для спрощення математичних перетворень розглянемо випадок стану системи, у яких величина  $q$  має певне значення. Це означає, що цей стан описується хвильовою функцією  $\psi = \psi_n$ , яка відповідає власному значенню  $q_n$ . Хвильова функція  $\psi_n$  і власне значення  $q_n$  задовольняють рівнянню

$$\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n, \quad (15.15)$$

де  $\hat{Q}$  – оператор величини  $q$ . Середнє значення величини  $q$  в цьому випадку відповідає власному значенню, тобто  $\langle q \rangle = q_n$ .

З іншого боку, середнє значення можемо також визначити у спосіб (15.9). Тому

$$\langle q \rangle = \int \psi_n^* \hat{Q} \psi_n dV.$$

Використаємо в цьому співвідношенні рівняння (15.15) і отримаємо

$$\langle q \rangle = \int \psi_n^* q_n \psi_n dV = q_n \int \psi_n^* \psi_n dV = q_n. \quad (15.16)$$

Тут використали, що власне значення  $q_n$  не залежить від координат, а також умову нормування для хвильової функції  $\int \psi_n^* \psi_n dV = 1$ .

Таким чином, **середні значення, що визначаються способом (15.9) та за допомогою власних значень, мають одне і те саме значення.**

## § 16 Комутативність операторів. Умови, за яких дві фізичні величини можуть бути виміряні одночасно

**1** Розглянемо дві фізичні величини  $a$  та  $b$ , яким відповідають оператори  $\hat{A}$  та  $\hat{B}$ . Чи завжди існує стан  $\psi$ , у якому обидва оператори мають визначені власні значення  $a$  та  $b$ ? Тобто, чи завжди хвильова функція  $\psi$  є власною функцією одночасно як для оператора  $\hat{A}$ , так і для оператора  $\hat{B}$ ? Іншими словами, чи можливо обидві фізичні величини  $a$  та  $b$  точно виміряти одночасно?

Для відповіді на це питання припустимо, що  $\psi$  є власною функцією як оператора  $\hat{A}$ , так і оператора  $\hat{B}$ . Тобто

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad \hat{B}\psi = b\psi,$$

де  $a$  й  $b$  – власні значення операторів  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  в стані, якому відповідає одна і та сама хвильова функція  $\psi$ . Помножимо першу рівність на оператор  $\hat{B}$ . Отримаємо

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}a\psi = a\hat{B}\psi = a b \psi.$$

Аналогічно

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}b\psi = b\hat{A}\psi = b a \psi.$$

Звідси випливає, що

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = 0,$$

або

$$\boxed{\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}}. \quad (16.1)$$

Оператори, які мають властивість (16.1), називають **комутативними**.

Отже, якщо всі власні функції операторів  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  збігаються, то ці оператори комутують між собою. Справедлива й зворотна теорема: якщо оператори  $\hat{A}$  й  $\hat{B}$  комутують між собою, то збігаються і їх власні функції.

Наведеній теоремі можна надати й інше формулювання. Дві величини  $a$  й  $b$  можна виміряти одночасно, тоді й тільки тоді, коли відповідні їм оператори  $\hat{A}$  й  $\hat{B}$  комутують між собою.

**2** Розглянемо приклади. Так координату  $x$  й відповідний їй імпульс  $p_x$  одночасно виміряти неможливо, оскільки оператори  $\hat{x}$  й  $\hat{p}_x$  не є комутативними між собою. Переконаємося у цьому. Як відомо,

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \partial / \partial x.$$

Тоді

$$\begin{aligned} (\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x) \psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) - x \frac{\partial}{\partial x} \psi = \\ &= -i\hbar \psi + x \frac{\partial}{\partial x} \psi - x \frac{\partial}{\partial x} \psi = -i\hbar \psi \neq 0. \end{aligned}$$

Тобто  $\hat{p}_x \hat{x} \neq \hat{x} \hat{p}_x$ , оператори  $\hat{x}$  й  $\hat{p}_x$  не комутують між собою. Звідси випливає, що одночасно точно визначити координату  $x$  та її проекцію імпульсу  $p_x$  неможливо. Це твердження узгоджується з принципом невизначеностей Гейзенберга.

Аналогічно можна впевнитись в тому, що координати  $x$  й  $y$  можна виміряти одночасно, тому що оператори  $\hat{x}$  й  $\hat{y}$  комутують.

## § 17 Квантування моменту імпульсу. Модуль і одна з проекцій моменту імпульсу. Азимутальне і магнітне квантові числа

**1** Момент імпульсу частинки  $\vec{L}$  відносно початку координат  $O$  у класичній механіці визначається векторним добутком

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}. \quad (17.1)$$

У квантовій механіці моменту імпульсу частинки  $\vec{L}$  відповідає оператор

$$\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}] = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}. \quad (17.2)$$

Тут використали, що оператор радіуса-вектора дорівнює самому радіусу-вектору, а оператор імпульсу визначається виразом  $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$  ( $\vec{\nabla}$  – оператор набла).

Можна виділити чотири величини, які пов'язані з моментом імпульсу частинки. Це три проекції і квадрат моменту імпульсу:  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  і  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ . Виникає питання: чи можна одночасно виміряти усі вищеперелічені чотири величини? Щоб відповісти на це питання, потрібно перевірити: чи комутують один з одним оператори цих фізичних величин? А саме, чи комутують оператори проекцій

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_y = i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (17.3)$$

і оператор квадрата моменту імпульсу

$$\hat{L}^2 = (\hat{L}_x)^2 + (\hat{L}_y)^2 + (\hat{L}_z)^2 \quad (17.4)$$

між собою? Нескладно провести розрахунки й переконатися, що комутують між собою тільки дві величини: оператор  $z$ -компоненти моменту імпульсу частинки й оператор квадрата моменту імпульсу. Це означає, що **одночасно можливо визначити лише  $z$ -компоненту моменту імпульсу частинки й оператор квадрата моменту імпульсу**. Дві інші проекції виявляються при цьому абсолютно невизначеними. Це означає, що «вектор» моменту не має певного напрямку й, отже, не може бути зображений, як у класичній механіці, за допомогою спрямованого відрізка прямої.

**2 Знайдемо квадрат модуля моменту імпульсу.** Для цього потрібно розв'язати рівняння на визначення власних значень квадрата моменту імпульсу

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi,$$

де  $\hat{L}^2$  – оператор квадрата моменту імпульсу частинки (див. вираз (17.4));  $L^2$  – власне значення квадрата моменту імпульсу частинки. Розв'язання цього рівняння є досить складним. Тому ми обмежимося наведенням лише кінцевих результатів: власні значення оператора квадрата моменту імпульсу дорівнюють

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (17.5)$$

Тут  $l$  – **квантове число, яке отримало назву азимутального**. Отже, модуль моменту імпульсу може мати лише дискретні значення, які описуються формулою

$$|L| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (17.6)$$

**3 Знайдемо  $z$ -компоненту моменту імпульсу.** Для цього потрібно розв'язати рівняння на визначення власних значень  $z$ -компоненти моменту імпульсу

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi, \quad (17.7)$$

де  $\hat{L}_z$  – оператор  $z$ -компоненти моменту імпульсу частинки;  $L_z$  – власне значення цієї величини. У сферичних координатах  $(r, \theta, \phi)$  оператор проекції моменту імпульсу на полярну вісь  $Z$  (від якої відлічується полярний кут  $\theta$ ) має достатньо простий вигляд

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

Отже, рівняння (17.7) набуває вигляду:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = L_z \psi. \quad (17.8)$$

Підстановка  $\psi = \exp(i\alpha\phi)$  у рівняння (17.8) приводить після скорочення на загальний множник  $\exp(i\alpha\phi)$  до алгебраїчного рівняння

$$-i\hbar\alpha = L_z,$$

з якого для  $\alpha$  отримуємо значення  $iL_z / \hbar$ . Таким чином, розв'язок рівняння (17.8) має вигляд

$$\psi = C \exp[i(L_z / \hbar)\varphi] .$$

Для того щоб ця функція була однозначною (одна з стандартних умов для хвильової функції), необхідно виконати умову  $\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$ , або

$$\exp[i(L_z / \hbar)(\varphi + 2\pi)] = \exp[i(L_z / \hbar)(\varphi)] .$$

Ця умова буде виконаною, коли буде виконуватись співвідношення  $\exp[i(L_z / \hbar) 2\pi] = 1$ , або  $L_z = m\hbar$ , де  $m$  – ціле додатне або від'ємне число або нуль. Отже, власні значення  $z$ -компоненти моменту імпульсу мають дискретний спектр:

$$L_z = m\hbar \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) . \quad (17.9)$$

Із причин, які з'ясуються далі, число  $m$  називається **магнітним квантовим числом**.

Оскільки проекція вектора не може перевищувати модуль цього вектора, то повинна виконуватися умова

$$|m\hbar| \leq \hbar\sqrt{l(l+1)} .$$

Звідси випливає, що максимальне можливе значення  $|m|$  дорівнює  $l$ . Таким чином, можемо записати

$$\begin{aligned} |L| &= \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (l = 0, 1, 2, \dots) , \\ L_z &= m\hbar \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) . \end{aligned} \quad (17.10)$$

Із цих формул випливає, що  $|L_z|$  завжди менше  $|L|$ . Отже, напрям моменту імпульсу не може збігатися з виділенням у просторі напрямом  $Z$ . Це узгоджується з тією обставиною, що напрям моменту в просторі є невизначеним.

Слід відзначити, що з правил квантування моменту випливає, що сталу Планка  $\hbar$  можна розглядати як природну одиницю моменту імпульсу.

**4 Момент імпульсу системи, що складається з декількох мікрочастинок**, дорівнює сумі моментів окремих часток. Сумарний момент, як і будь-який момент взагалі, визначається виразом

$$|L_{\text{рез}}| = \hbar\sqrt{L(L+1)} , \quad (17.11)$$

де  $L$  – азимутальне квантове число результуючого моменту. Для випадку системи, яка складається з двох частинок, число  $L$  може мати такі значення:

$$L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2| , \quad (17.12)$$

де  $l_1$  й  $l_2$  – числа, що визначають модулі моментів, які складаються, за формулою

$$|L_i| = \hbar\sqrt{l_i(l_i+1)} .$$

## ТЕМА 4 ФІЗИКА АТОМІВ І МОЛЕКУЛ

### § 18 Атом водню з погляду квантової механіки. Квантові числа: $n$ , $l$ , $m_l$ . Кратність виродження. Правило відбору

**1** Розглянемо систему, яка складається з нерухомого ядра із зарядом  $Ze$  ( $Z$  – ціле число), і електрона, який рухається навколо нього. При  $Z > 1$  така система називається воднеподібним іоном; при  $Z = 1$  вона є атомом водню.

Потенціальна енергія електрона дорівнює

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

( $r$  – відстань електрона від ядра). Отже, рівняння Шредінгера має вигляд

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (18.1)$$

( $m_e$  – маса електрона).

Поле, у якому рухається електрон, є центральносиметричним. Тому доцільно скористатися сферичною системою координат:  $r, \theta, \varphi$ . Підставивши в (18.1) вираз оператора Лапласа в сферичних координатах, прийдемо до рівняння

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (18.2)$$

Можна показати, що рівняння (18.2) має розв'язки для хвильової функції, які задовольняють стандартні умови (тобто однозначні, скінченні й безперервні), у таких випадках: 1) при будь-яких додатних енергіях  $E$ ; 2) при дискретних від'ємних значеннях енергії, що дорівнюють

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad (n=1,2,3,\dots). \quad (18.3)$$

Випадок  $E > 0$  відповідає електрону, що пролітає поблизу ядра й віддаляється знову на нескінченність. Випадок  $E < 0$  відповідає електрону, який рухається навколо ядра. Порівняння з виразом для енергії, яке отримано в теорії Бора, показує, що квантова механіка приводить до таких самих значень енергії водневого атома. Однак у квантовій механіці ці значення утворюються як наслідок основних положень цієї науки. Бору ж для отримання такого результату довелося вводити спеціальні додаткові припущення.

Власні функції рівняння (18.2) містять три цілих параметри  $n, l$  й  $m$ :

$$\psi = \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi). \quad (18.4)$$

Параметр  $n$ , який називають **головним квантовим числом**, збігається з номером рівня енергії (див. формулу (18.3)). Параметри  $l$  і  $m$  є **азимутальним й магнітним квантовим числом**, які визначають за відповідними формулами модуль моменту імпульсу й проекцію моменту на деякий напрям  $Z$ .

Розв'язки для хвильової функції, які задовольняють стандартні умови, мають місце лише для значень  $l$ , які не перевищують  $n-1$ . Отже, при заданому  $n$  квантове число  $l$  може набувати  $n$  різних значень:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

При заданому  $l$  квантове число  $m$  може набувати  $2l+1$  різних значень:

$$m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, +1, \dots, l-1, l.$$

2 Згідно з (18.3) енергія електрона залежить тільки від головного квантового числа  $n$ . Отже, кожному власному значенню енергії  $E_n$  (крім  $E_1$ ) відповідає кілька власних функцій  $\psi_{n,l,m}$ , які відрізняються значеннями квантових чисел  $l$  і  $m$ . Це означає, що атом водню може мати одне і те саме значення енергії, перебуваючи в декількох різних станах. У табл. 1 наведені стани, що відповідають першим трьом енергетичним рівням.

Стани з однаковою енергією називаються **виродженими**, а число різних станів з яким-небудь значенням енергії називається **кратністю виродження** відповідного енергетичного рівня.

Кратність виродження рівнів водню легко обчислити, виходячи з можливих значень для  $l$  й  $m$ . Кожному з  $n$  значень квантового числа  $l$  відповідає  $2l+1$  значень квантового числа  $m$ . Отже, число різних станів, що відповідають даному  $n$ , дорівнює

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (18.5)$$

(див. також пункт 5 цього параграфа). Для обчислення суми в (18.5) використали формулу арифметичної прогресії.

Таблиця 18.1

Рівень енергії $E_n$	Псі-функція $\Psi_{n,l,m}$	Значення			Рівень енергії $E_n$	Псі-функція $\Psi_{n,l,m}$	Значення		
		$n$	$l$	$m$			$n$	$l$	$m$
$E_1$	$\Psi_{1,0,0}$	1	0	0	$E_3$	$\Psi_{3,0,0}$	3	0	0
$E_2$	$\Psi_{2,0,0}$	2	0	0		$\Psi_{3,1,-1}$	3	1	-1
	$\Psi_{2,1,-1}$	2	1	-1		$\Psi_{3,1,0}$	3	1	0
	$\Psi_{2,1,0}$	2	1	0		$\Psi_{3,1,+1}$	3	1	+1
	$\Psi_{2,1,+1}$	2	1	+1		$\Psi_{3,2,-2}$	3	2	-2
						$\Psi_{3,2,-1}$	3	2	-1
						$\Psi_{3,2,0}$	3	2	0
						$\Psi_{3,2,+1}$	3	2	+1
						$\Psi_{3,2,+2}$	3	2	+2

Таким чином, кратність виродження енергетичних рівнів водневого атома дорівнює  $n^2$  (див. також табл. 1, п.5 цього параграфа).

**3** Стани з різними значеннями азимутального квантового числа  $l$  відрізняються величиною моменту імпульсу. В атомній фізиці застосовуються запозичені зі спектроскопії умовні позначення станів електрона з різними значеннями моменту імпульсу. Електрон, що перебуває у стані з  $l=0$ , називають **s-електроном** (відповідний стан – s-станом), з  $l=1$  – **p-електроном**, з  $l=2$  – **d-електроном**, з  $l=3$  – **f-електроном**, потім ідуть g, h і т.д. вже за алфавітом. Значення головного квантового числа записують перед умовною позначкою квантового числа  $l$ . Таким чином, електрон у стані з  $n=3$  і  $l=1$  позначається символом  $3p$  і т.д.

Оскільки  $l$  завжди менше  $n$ , можливі такі стани електрона:

$$\begin{aligned} &1s, \\ &2s, 2p, \\ &3s, 3p, 3d, \\ &4s, 4p, 4d, 4f \end{aligned}$$

Схема рівнів енергії зображена на рис. 18.1. На цій схемі відображено (правда, частково) виродження рівнів, крім того, вона має ще ряд істотних переваг, які скоро стануть очевидними.

**4** Ми знаємо, що випромінювання й поглинання світла відбувається при переходах електрона з одного рівня на інший. У квантовій механіці доводять, що для **азимутального квантового числа**  $l$  є **правило відбору**

$$\Delta l = \pm 1 \quad (18.6)$$



Це означає, що можливі тільки такі переходи, при яких  $l$  змінюється на одиницю. Правило (18.5) обумовлене тим, що фотон має власний момент імпульсу (спін). При випромінюванні фотон виносить з атома цей момент, а при поглинанні приносить, так що правило відбору (18.6) є просто наслідок закону збереження моменту імпульсу.

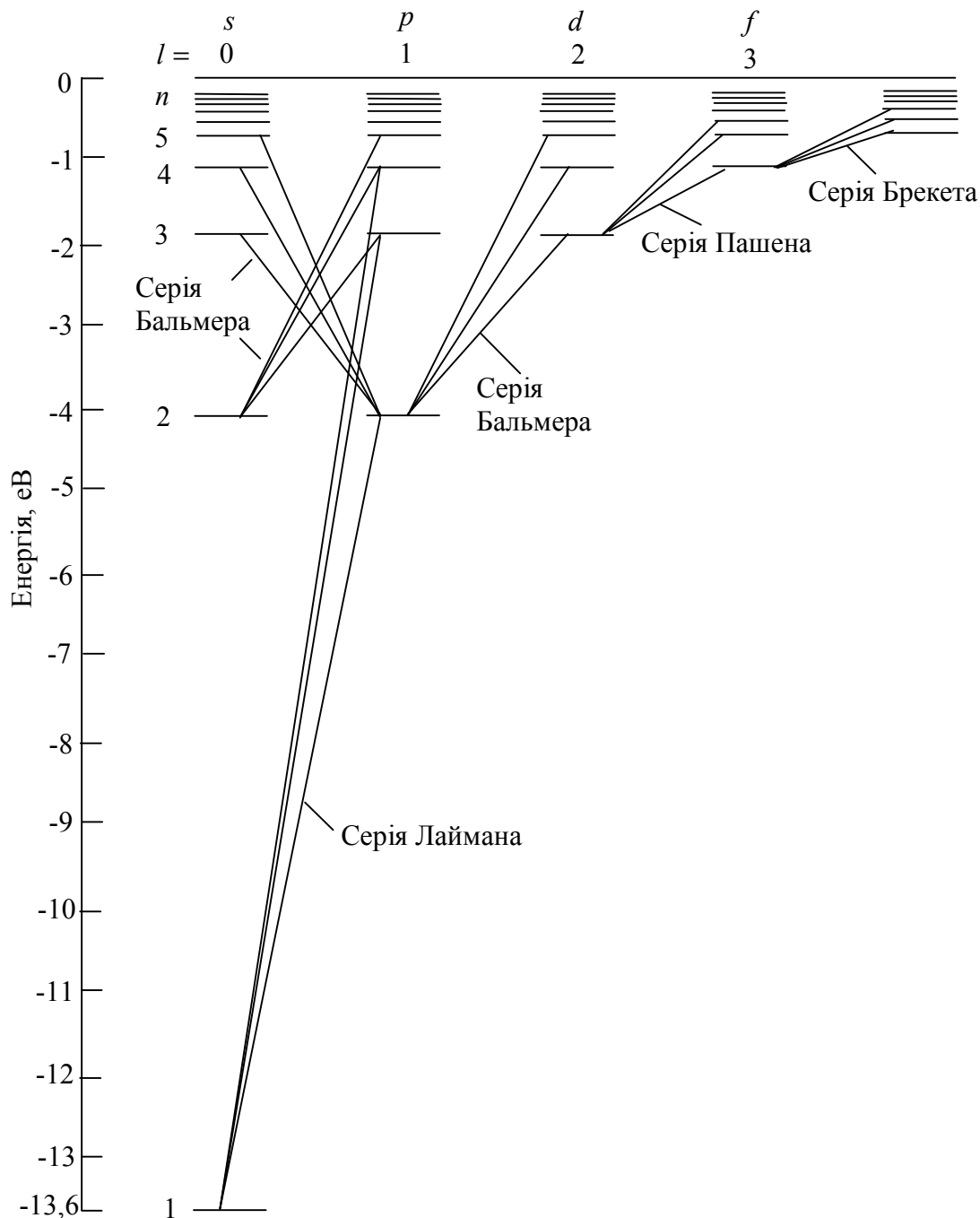


Рисунок 18.1

На рис. 18.1 показані переходи, які дозволені правилом (18.6). Користуючись умовними позначками станів електрона, переходи, які приводять до виникнення серії Лаймана, можна записати у вигляді

$$np \rightarrow 1s \quad (n = 2, 3, \dots);$$

серії Бальмера відповідають переходи

$$np \rightarrow 2s, \quad ns \rightarrow 2p, \quad nd \rightarrow 2p \quad (n = 3, 4, \dots) \text{ і т.д.}$$

Стан  $1s$  є основним станом атома водню. У цьому стані атом має мінімальну енергію. Щоб перевести атом з основного стану в збуджене (тобто в стан з більшою енергією), йому необхідно передати енергію. Це може бути здійснене за рахунок теплового зіткнення атомів (із цієї причини нагріті тіла світяться – атоми випромінюють, повертаючись зі збудженого в основний стан), або за рахунок зіткнення атома з досить швидким електроном, або, нарешті, за рахунок поглинання атомом фотона.

Фотон при поглинанні його атомом зникає, передаючи атому всю свою енергію. Атом не може поглинути тільки частину фотона, тому що фотон, як і електрон, як й інші елементарні частинки, є неподільним. Оскільки атом, який поглинає, як правило, знаходиться в основному стані, спектр поглинання водневого атома повинен складатися з ліній, що відповідають переходам

$$1s \rightarrow np \ (n = 2, 3, \dots).$$

Цей результат повністю узгоджується з дослідом.

**5** Слід зазначити, що в даному параграфі не було враховано, що електрон також має власний момент імпульсу (спін електрона). Спін електрона характеризується квантовим числом  $s = 1/2$  (аналог орбітального квантового числа  $l$ ). При цьому власний момент імпульсу електрона дорівнює  $L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \hbar\sqrt{3}/2$ . Проекція на виділену вісь  $Z$  власного моменту імпульсу може набувати  $2s+1=2$  дискретних значень. Тобто проекція власного моменту імпульсу дорівнює  $L_{sz} = m_s \hbar$ , де спінове квантове число  $m_s$  (аналог магнітного квантового числа  $m$ ) може набувати двох значень:  $+s = 1/2$  і  $-s = -1/2$ . Щоб урахувати спінове виродження, необхідно формулу (18.5) помножити на 2. Тобто **виродження в атомі водню дорівнює  $2n^2$** .

## § 19 Магнетизм атомів. Дослід Штерна й Герлаха. Спін електрона

**1 Магнетизм атомів.** Із часу Ампера магнетизм пояснювався електричними струмами, які, за його уявленнями, циркулюють усередині малих частинок речовини (атомів і молекул). Природа цих струмів була встановлена з появою електронних уявлень про будову речовини і теорії Бора. Вважалося, що молекулярні струми Ампера створюються електронами, які обертаються навколо ядра атома.

Оскільки електрони, які утворюють оболонку атома, електрично заряджені й мають маси, з їх рухом в оболонці (такий рух називають орбітальним) пов'язаний не тільки момент імпульсу  $\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$ , але й магнітний момент атома  $\vec{p}_m = I \vec{S}$ . Зв'язок між цими двома моментами вже розглядався раніше. Для одного електрона, який рухається по круговій орбіті, використовуючи методи класичної фізики, було отримано

$$\vec{p}_m = \Gamma \vec{L}, \quad (19.1)$$

де

$$\Gamma = -\frac{|e|\hbar}{2m_e}. \quad (19.2)$$

У цьому випадку відношення магнітного моменту електрона до моменту імпульсу  $p_m / L$  називається **гіромагнітним відношенням** для орбітального руху електрона.

Такий самий зв'язок між магнітним моментом і моментом імпульсу зберігається й у квантовій механіці. Однак тепер необхідно класичні уявлення замінити квантовими. Як і у випадку моменту імпульсу квантова механіка розв'язує задачу про магнітний момент атома з використанням операторного методу. Таким чином, вивчення магнітного моменту частинки зводиться до вивчення властивостей оператора  $\hat{p}_m$ , який відповідно до (19.1) має вигляд

$$\hat{\vec{p}}_m = \Gamma \hat{\vec{L}}. \quad (19.3)$$

Оскільки оператори  $\hat{\vec{L}}$  й  $\hat{\vec{p}}_m$  відрізняються тільки сталим множником  $\Gamma$ , то їх властивості подібні. Магнітний момент і момент імпульсу квантуються за однаковими правилами. Складові магнітного моменту на будь-які два різних напрями не можуть одночасно мати визначеного значення. У стаціонарному стані визначені значення можуть мати тільки квадрат магнітного моменту й одна з його проєкцій на координатні осі. За таку проєкцію береться проєкція на вісь  $Z$ . З формул (19.3), (19.2) і того, що для орбітального руху електрона  $L_z = m\hbar$  ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ), безпосередньо випливає

$$p_{m,z} = \Gamma L_z = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} L_z = -\mu_B m, \quad (19.4)$$

де

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл}. \quad (19.5)$$

Сталу  $\mu_B$  називають **магнетоном Бора**.

**2 Схема досліду Штерна й Герлаха.** Наявність в атомів магнітних моментів і їх квантування було доведено прямими дослідями Штерна й Герлаха в 1921 р. У посудині з високим вакуумом створювався за допомогою діафрагм  $D$  і  $D'$  (рис. 19.1) різко обмежений атомний пучок досліджуваного елемента, який випаровувався з печі  $K$ . Пучок проходив через сильне магнітне поле з індукцією  $B$  між полюсними наконечниками  $N$  й  $S$  електромагніта. Один з наконечників ( $N$ ) мав вигляд призми з гострим ребром, а уздовж іншого ( $S$ ) була виточена канавка. Завдяки такій конструкції полюсних наконечників магнітне поле було сильно неоднорідним. Після проходження через магнітне поле пучок попадав на фотопластинку  $P$  й залишав на ній слід.

**3 Розрахунок поведінки атомного пучка.** Якщо  $\vec{p}_m$  – магнітний момент атома, то на атом у неоднорідному магнітному полі діє сила (див. (6.4))

$$\vec{F} = (\vec{p}_m \cdot \nabla) \vec{B}.$$

Спрямуємо вісь  $Z$  уздовж магнітного поля (тобто від  $N$  до  $S$  перпендикулярно до полюсних наконечників). Тоді проєкція сили в цьому напрямку буде

$$F_z = p_{m,x} \frac{\partial B_z}{\partial x} + p_{m,y} \frac{\partial B_z}{\partial y} + p_{m,z} \frac{\partial B_z}{\partial z}.$$

Можна показати, що першими двома доданками в цьому виразі можна знехтувати. Тоді середнє за часом значення  $z$ -компоненти сили, що діє на атом з магнітним моментом  $\vec{p}_m$ , дорівнює

$$\bar{F}_z = p_{m,z} \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (19.6)$$

Під дією цієї сили атоми будуть зміщуватися вздовж осі  $Z$  (див. рис. 19.1).

Варто очікувати різних результатів досліду з класичної й з квантової точок зору. У дослідях Штерна й Герлаха спочатку отримували слід атомного пучка на фотопластинці при виключеному магнітному полі, а потім при включеному. Якщо б проєкція  $p_{m,z}$  могла набувати будь-який неперервних значень, як того вимагає класична теорія, то сила  $\vec{F}_z$  також

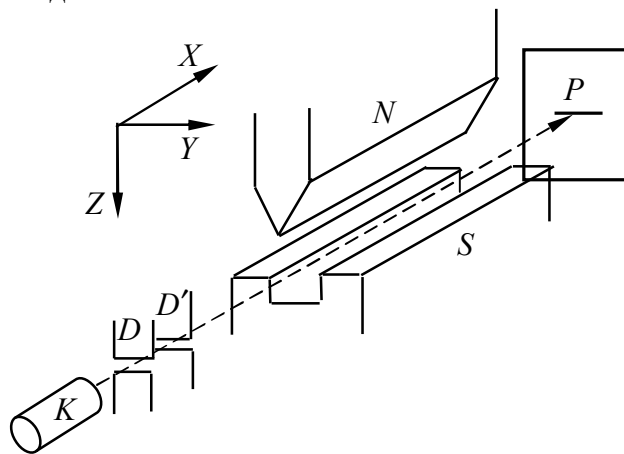


Рисунок 19.1

набувала б будь-який неперервних значень. Включення магнітного поля приводило б тоді тільки до *розширення пучка вздовж осі Z*.

Інший результат варто очікувати, виходячи з *квантової теорії*. У цьому випадку проекція  $p_{m,z}$ , а з нею й середня сила  $\vec{F}_z$  можуть набувати тільки *ряд дискретних вибраних значень*. Якщо орбітальне квантове число атома дорівнює  $l$ , то за квантовою теорією пучок вздовж осі  $Z$  розщепиться на  $2l+1$  пучків (кількість таких пучків дорівнює числу можливих значень, які може набути квантове число  $m$ ). Таким чином, залежно від значення числа  $l$  варто було б очікувати, що пучок розщепиться на 1, 3, 5, ... складових. Очікуване число складових пучка **повинно було б бути завжди непарним**.

**4 Результати досліду Штерна й Герлаха.** У результаті досліду на фотопластинці спостерігалось розщеплення пучка атомів. *Таким чином, досліди Штерна й Герлаха довели квантування проекції  $p_{m,z}$ . Однак їх результати не завжди відповідали теорії, яка викладена вище*. Так у дослідах використовувалися пучки атомів срібла, для яких орбітальне квантове число дорівнювало нулю ( $l=0$ ). Відповідно до квантової теорії, яка викладена вище, розщеплення пучків не повинно було б відбуватися (розщеплених пучків повинно бути  $2l+1=2\cdot 0+1=1$ ). В експерименті ж спостерігалось, що у магнітному полі пучок розщеплювався вздовж осі  $Z$  на дві складові. Аналогічний результат було отримано для атомів водню. Для атомів інших хімічних елементів була отримана більш складна картина розщеплення, однак число розщеплених пучків було не тільки непарним, як це передбачала теорія, але й парним, що суперечило їй. Таким чином, *в квантову теорію необхідно було внести корективи*.

**4 Спін.** Розглядаючи невідповідність теорії та експерименту Штерна та Герлаха також потрібно взяти до уваги результати дослідів Ейнштейна й де Гааза з визначення гіромагнітного відношення. Для заліза виявилось, що гіромагнітне відношення дорівнює

$$\frac{p_m}{L} = \left| \frac{e}{m_e} \right|, \quad (19.7)$$

тобто є удвічі більшим, ніж випливає з класичної теорії (див. співвідношення (19.1) та (19.2)).

Також, виявилось, що спектральні терми лужних металів мають так звану дублетну структуру, тобто складаються із двох близько розміщених рівнів. Для опису цієї структури трьох квантових чисел  $n, l, m$  виявилось недостатньо – необхідно було ввести четверте квантове число. Це було головним мотивом, через який Уленбек й Гаудсміт у 1925 р. ввели *гіпотезу про спін електрона*. Сутність цієї гіпотези полягає в тому, що в електрона є не тільки момент імпульсу й магнітний момент, які пов'язані з переміщенням цієї частинки як цілого. *Електрон має також власний, або внутрішній механічний момент імпульсу. Цей власний момент імпульсу й називається **спіном** (від англійського слова to spin – вертїтися). Відповідний йому магнітний момент називається **спіновим магнітним моментом***. Ці моменти позначаються відповідно через  $L_s$  і  $p_{m,s}$  на відміну від орбітальних моментів  $L_l$  і  $p_{m,l}$ . Четверте квантове число позначають просто через  $s$  і називають **спіном**.

Самі Уленбек і Гаудсміт припускали, що спін виникає через обертання електрона навколо власної осі. Через це існуюча в той час модель атома отримала ще більшу подібність до Сонячної системи. Електрони (планети) не тільки обертаються навколо ядра (Сонця), але й навколо власних осей. Однак відразу ж з'ясувалася хибність такого класичного уявлення про спін (такі уявлення не змогли пояснити результат (19.7)). У 1928 р. Дірак показав, що спін електрона автоматично випливає з його теорії електрона, яка була заснована на релятивістському хвильовому рівнянні. У теорії Дірака було отримано гіромагнітне відношення для власних моментів, яке збігалось з дослідом (див. (19.7)). Таким чином, спін електрона є квантово-релятивістським ефектом, який не має класичного тлумачення. Потім

концепція спіну як внутрішнього моменту імпульсу була поширена на інші елементарні й складні частинки й знайшла підтвердження й широке застосування в сучасній фізиці.

**5 Спін електрона.** У загальному курсі фізики немає можливості викласти докладну теорію спіну. Ми візьмемо як вихідне положення, що спіновому моменту імпульсу відповідає векторний оператор, проекції якого мають властивості, подібні до властивостей оператора орбітального моменту імпульсу. Із цього випливає, що визначені значення в одному і тому самому стані можуть мати тільки квадрат повного спіну й одна з його проекцій на визначену вісь (вісь  $Z$ ). Якщо максимальне значення проекції  $L_{z,s}$  дорівнює  $s \hbar$  ( $s$  – спінове квантове число, співвідношення написано за аналогією з  $L_{z,l} = m_{\max} \hbar$ , де  $m_{\max} = l$ ), то число всіх можливих проекцій, які відповідають даному квантовому числу  $s$ , буде дорівнює  $2s+1$  (у випадку орбітального руху має місце аналогічне співвідношення  $2l+1$ ).

У Дослідах Штерна й Герлаха атоми водню перебували в  $s$ -стані, тобто їх орбітальні моменти дорівнювали нулю ( $l=0$ ). Тому Уленбек і Гаудсміт припустили, що розщеплення пучка обумовлене не орбітальним, а спіновим магнітним моментом. Те саме стосується й дослідів з атомами срібла. Атом срібла має єдиний зовнішній електрон. Атомний остов через його симетрію спінового і магнітного моментів не має. Весь магнітний момент атома срібла створюється тільки одним зовнішнім електроном. Коли атом перебуває в нормальному, тобто  $s$ -стані, то орбітальний момент валентного електрона дорівнює нулю – весь момент є спіновим. Тому результати дослідів у цьому випадку визначалися виключно спіновими моментами електрона.

Досліди Штерна й Герлаха показали, що для атома срібла та водню ( $l=0$ ) пучок розщеплювався на два пучки. Це означає, що  $2s+1=2$ . Звідси отримуємо для електрона  $s=1/2$ .

Для електрона, таким чином, спінове квантове число дорівнює  $1/2$ :

$$\boxed{s=1/2}. \quad (19.8)$$

Для власного моменту імпульсу є справедливим співвідношення, аналогічне до орбітального моменту імпульсу електрона:

$$\boxed{L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \hbar \sqrt{3}/2}. \quad (19.9)$$

Проекція власного моменту імпульсу на вісь  $Z$  визначається співвідношенням

$$\boxed{L_{z,s} = \hbar m_s \quad (m_s = \pm s = \pm 1/2)}. \quad (19.10)$$

Виміри проекції магнітного моменту  $p_{m,z}$  в досліді Штерна й Герлаха показали, що для атомів водню й срібла величина  $p_{m,z}$  дорівнює магнетону Бору  $\mu_B$ . Таким чином, було отримано гіромагнітне відношення для електрона

$$\left| \frac{p_{m,z}}{L_z} \right| = \frac{\mu_B}{\hbar/2} = \left| \frac{e}{m_e} \right|, \quad (19.11)$$

яке відповідає результату, що був знайдений Ейнштейном і де Гаазом (див. (19.7)).

## § 20 Принцип Паулі. Періодична система елементів Д.І. Менделєєва з погляду квантової механіки

1 У класичній механіці частинки однакової природи (наприклад, електрони) можна розрізняти. Пронумерувавши їх у деякий момент часу  $t_0$ , можна спостерігати за кожною з них під час її руху по траєкторії й у будь-який момент часу  $t$  зазначити, який номер був привласнений тій або іншій частинці.

У квантовій механіці ця проблема розглядається принципово інакше. Через принцип невизначеності (співвідношення невизначеностей Гейзенберга) поняття траєкторії частинки втрачає зміст. Тому стежити за кожною з однакових частинок і тим самим розрізняти їх неможливо. Таким чином, у квантовій механіці частинки однакової природи повністю втрачають свою «індивідуальність» – вони виявляються нерозрізненими. Це твердження називають **принципом нерозрізненості**, або **принципом тотожності однакових частинок**.

**2** Принцип нерозрізненості однакових частинок приводить до глибоких фізичних наслідків. Нехай є система із двох тотожних частинок. Позначивши сукупність координат і проекції спіну частинок буквами  $\xi_1$  й  $\xi_2$ , розглянемо хвильову функцію системи  $\psi(\xi_1, \xi_2)$ . Оскільки частинки нерозрізнені, перестановка  $\xi_1$  й  $\xi_2$  не повинна приводити до зміни фізичних властивостей системи, тобто змінювати квадрат модуля хвильової функції. Отже, повинна виконуватися рівність

$$|\psi(\xi_1, \xi_2)|^2 = |\psi(\xi_2, \xi_1)|^2.$$

При цьому можливі два випадки:

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1) \text{ і } \psi(\xi_1, \xi_2) = -\psi(\xi_2, \xi_1).$$

У першому випадку функція  $\psi$  виявляється симетричною відносно зміни  $\xi_1$  й  $\xi_2$ , у другому випадку – антисиметричною.

Виявляється, що частинки з нульовим або цілим спіном описуються симетричними, а частинки з напівцілим спіном – антисиметричними хвильовими функціями. Подальший аналіз, який через його складність ми викладати тут не маємо можливості, приводить до таких результатів.

Частинки із цілим або нульовим спіном можуть перебувати в межах даної системи в однаковому стані в необмеженій кількості. Такі частинки підкоряються статистиці, розробленою Бозе й Ейнштейном, і тому називаються **бозонами**. Можна сказати, що бозони є «колективістами», їм «подобається» накопичуватися в одному і тому самому стані.

Частинки з напівцілим спіном можуть перебувати у квантових станах тільки поодиночі. Такі частинки підкоряються статистиці, розробленої Фермі й Діраком, і називаються **ферміонами**. Ферміони є «індивідуалістами».

У 1925 р. Паулі сформулював **принцип, що** має його ім'я, **відповідно до якого в одному і тому самому атомі (або в якій-небудь іншій квантовій системі) не може бути двох електронів (або інших частинок з напівцілим спіном), що мають однакову сукупність квантових чисел**. Іншими словами, у одному і тому самому стані не можуть перебувати одночасно два електрони.

**3 Розподіл електронів за енергетичними станами в атомі.** Нагадаємо, що стан електрона в атомі характеризується чотирма квантовими числами:

головним	$n$ ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ),
азимутальним	$l$ ( $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ),
магнітним	$m_l$ ( $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ ),
спіновим	$m_s$ ( $m_s = +1/2, -1/2$ ).

Енергія стану атома в загальному випадку залежить в основному від чисел  $n$  і  $l$ . Крім того, є слабка залежність енергії від чисел  $m_l$  і  $m_s$ , оскільки їх значення пов'язані з взаємною орієнтацією моментів імпульсів, від якої залежить енергія спин-орбітальної взаємодії. Енергія стану сильніше зростає зі збільшенням числа  $n$ , ніж зі збільшенням  $l$ . Тому, як правило, стан з більшим  $n$  має незалежно від значення  $l$  більшу енергію.

В основному (незбудженому) стані атома електрони повинні розміщуватися на найнижчих доступних для них енергетичних рівнях. Пояснення характеру заповнення основних станів атомів дає принцип Паулі. Стосовно до електронів в атомі цей принцип

можна сформулювати так: в одному і тому самому атомі не може бути двох електронів, що мають однакову сукупність квантових чисел  $n, l, m_l$  і  $m_s$ .

Сукупність електронів, що мають однакові значення квантового числа  $n$ , утворюють **оболонку**. Оболонки підрозділяються на **підоболонки**, що відрізняються значенням квантового числа  $l$ . Відповідно до значень  $n$  оболонкам дають позначення, запозичені зі спектроскопії рентгенівських променів:

Розподіл можливих станів електрона в атомі на оболонки й підоболонки показаний у табл. 1, у якій замість позначень  $m_s = \pm 1/2$  застосовані для наочності символи  $\uparrow\downarrow$ . Підоболонки, як зазначено в таблиці, можуть позначатися двома способами, наприклад,  $L_1$  (нижній індекс 1 позначає номер підоболонки) або  $2s$  ( $n=2, l=0$ ).

4 Принцип Паулі дає пояснення періодичної повторюваності властивостей атомів. Простежимо побудову **періодичної системи елементів Д.І.Менделєєва**. Почнемо з атома водню, який має один електрон. Кожний наступний атом будемо отримувати, збільшуючи заряд ядра попереднього атома на одиницю й додаючи один електрон, який ми будемо розміщувати в доступний для нього відповідно до принципу Паулі стан з найменшою енергією.

але з антипаралельною орієнтацією спінів. Так звана **електронна конфігурація** атома може бути записана як  $1s^2$  (два  $1s$ -електрони). Основним станом буде  $^1S_0 (L=0, S=0, J=0)$ .

На атомі гелію закінчується заповнення  $K$ -оболонки. Третій електрон атома літію може зайняти лише рівень  $2s$  (рис. 20.1). Утворюється електронна конфігурація  $1s^2 2s$ . Основний стан характеризується квантовими числами  $L=0, S=1/2, J=1/2$ . Тому основним станом, як і у водню, буде  $^2S_{1/2}$ . Третій електрон атома літію, займаючи більш високий енергетичний рівень, ніж інші два електрони, виявляється слабкіше, ніж вони, пов'язаним з ядром атома. У результаті він визначає оптичні й хімічні властивості атома.

У четвертого елемента, берилія, повністю заповнюється підоболонка  $2s$ . У наступних шести елементів ( $B, C, N, O, F$  і  $Ne$ ) відбувається заповнення електронами підоболонки  $2p$ , у результаті чого неон має повністю заповнені оболонки  $K$  (двома електронами) і  $L$  (вісьма електронами), що утворюють стійку систему, подібну до системи гелію, чим обумовлюються специфічні властивості інертних газів.

Процес забудови електронних оболонок перших 36 елементів періодичної системи поданий у табл. 20.2. Одинадцятий елемент – натрій, крім заповнених оболонок  $K$  і  $L$ , має один електрон у підоболонці  $3s$ . Електронна конфігурація має вигляд  $1s^2 2s^2 2p^2 3s$ . Основним станом буде  $^2S_{1/2}$ . Електрон  $3s$  пов'язаний з ядром слабкіше від інших і є **валентним**, або **оптичним електроном**. У зв'язку із цим хімічні й оптичні властивості натрію подібні до властивостей літію.

Таблиця 20.1

Оболонка	$n$	$l$	$m_l$	$m_s$	Підоболонка	Оболонка	$n$	$l$	$m_l$	$m_s$	Підоболонка
$K$	1	0	0	$\uparrow\downarrow$	$K(1s)$	$N$	4	0	0	$\uparrow\downarrow$	$N_1(4s)$
$L$	2	0	0	$\uparrow\downarrow$	$L_1(2s)$			1	-1 0 +1	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$N_2(4p)$
		1	-1 0 +1	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$L_2(2p)$			2	-2 -1 0 +1 +2	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$N_3(4d)$
$M$	3	0	0	$\uparrow\downarrow$	$M_1(3s)$			3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$N_4(4f)$
		1	-1 0 +1	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$M_2(3p)$						
		2	-2	$\uparrow\downarrow$	$M_3(3d)$						
			-1	$\uparrow\downarrow$							
			0	$\uparrow\downarrow$							
+1 +2	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$										

У наступних за натрієм елементів нормально заповнюються підоболонки  $3s$  й  $3p$ . Підоболонка  $3d$  при даній загальній конфігурації виявляється енергетично вищою від підоболонки  $4s$ , у зв'язку із чим при незавершеному в цілому заповненні оболонки  $M$  починається заповнення оболонки  $N$ . Підоболонка  $4p$  лежить уже вище, ніж  $3d$ , так що після  $4s$  заповнюється підоболонка  $3d$ .

З аналогічними відступами від звичайної послідовності, що повторюються час від часу, здійснюється забудова електронних рівнів всіх атомів. При цьому періодично



повторюються подібні електронні конфігурації (наприклад,  $1s, 2s, 3s$  і т.д.) понад повністю заповнених підоболонки, чим обумовлюється періодична повторюваність хімічних і оптичних властивостей атомів.

Таблиця 20.2

Елемент	$K$	$L$		$M$			$N$	
	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$
1 H	1	—	—	—	—	—	—	—
2 He	2	—	—	—	—	—	—	—
3 Li	2	1	—	—	—	—	—	—
4 Be	2	2	—	—	—	—	—	—
5 B	2	2	1	—	—	—	—	—
6 C	2	2	2	—	—	—	—	—
7 N	2	2	3	—	—	—	—	—
8 O	2	2	4	—	—	—	—	—
9 F	2	2	5	—	—	—	—	—
10 Ne	2	2	6	—	—	—	—	—
11 Na	2	8		1	—	—	—	—
12 Mg	2	8		2	—	—	—	—
13 Al	2	8		2	1	—	—	—
14 Si	2	8		2	2	—	—	—
15 P	2	8		2	3	—	—	—
16 S	2	8		2	4	—	—	—
17 Cl	2	8		2	5	—	—	—
18 Ar	2	8		2	6	—	—	—
19 K	2	8		8		—	1	—
20 Ca	2	8		8		—	2	—
21 Sc	2	8		8		1	2	—
22 Ti	2	8		8		2	2	—
23 V	2	8		8		3	2	—
24 Cr	2	8		8		5	1	—
25 Mn	2	8		8		5	2	—
26 Fe	2	8		8		6	2	—
27 Co	2	8		8		7	2	—
28 Ni	2	8		8		8	2	—
29 Cu	2	8		8		10	1	—
30 Zn	2	8		8		10	2	—
31 Ga	2	8		8		10	2	1
32 Ge	2	8		8		10	2	2
33 As	2	8		8		10	2	3
34 Se	2	8		8		10	2	4
35 Br	2	8		8		10	2	5
36 Kr	2	8		8		10	2	6

## § 21 Спонтанне й вимушене випромінювання. Коефіцієнти Ейнштейна

1 Відповідно до теорії Бора мають місце два види переходів атомів між енергетичними рівнями. Перший вид – перехід з більш високого енергетичного рівня  $E_n$  на більш низький  $E_m$  з випромінюванням фотона  $\hbar\omega = E_n - E_m$ . Такі переходи будемо називати **спонтанними** (атом спонтанно, самочинно переходить із більш високого енергетичного

рівня на більш низький) (див. рис. 21.1а). Другий вид – перехід з більш низького енергетичного рівня  $E_m$  на більш високий  $E_n$  під дією випромінювання (поглинання фотона  $\hbar\omega = E_n - E_m$ , який падає на атом). Такі переходи називаються **вимушеним поглинанням** (перехід залежить від наявності й інтенсивності поля випромінювання, тому називається вимушеним) (див. рис. 21.1б).

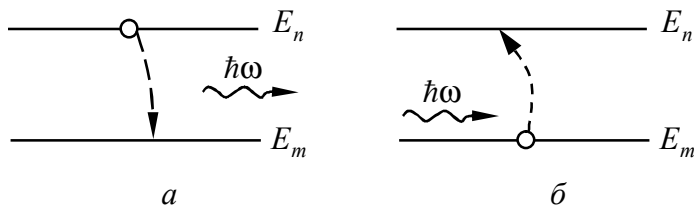


Рисунок 21.1 – Схеми: а – спонтанного випромінювання; б – вимушеного поглинання

2 У 1916 р. Ейнштейн звернув увагу на те, що двох зазначених вище видів випромінювання недостатньо для пояснення існування стану теплової рівноваги між випромінюванням і речовиною. Дійсно, імовірність спонтанних переходів визначається лише внутрішніми властивостями атомів і, отже, не може залежати від інтенсивності падаючого випромінювання, у той час як імовірність «поглинальних» переходів залежить як від властивостей атомів, так і від інтенсивності падаючого випромінювання. Для можливості встановлення рівноваги при довільній інтенсивності падаючого випромінювання необхідно існування «випромінювальних» переходів, імовірність яких зростала б зі збільшенням інтенсивності випромінювання. Тобто «випромінювальних» переходів, які залежать, спричиняються випромінюванням. Випромінювання, яке виникає в результаті таких переходів, називається **вимушеним**, або **індукованим випромінюванням**.

Вимушене випромінювання має досить важливі властивості. Напрямок його поширення в точності збігається з напрямом поширення зовнішнього випромінювання, яке спричинило перехід. Також збігаються частоти, фази й поляризації цих випромінювань. Отже, вимушене випромінювання й те, яке спричинило перехід, виявляються строго когерентними. Ця особливість вимушеного випромінювання лежить в основі дії підсилювачів і генераторів світла, яких називають лазерами.

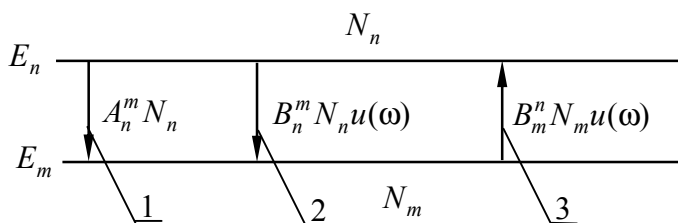


Рисунок 21.2 – Переходи атома: 1 – спонтанне випромінювання; 2 – вимушене випромінювання; 3 – вимушене поглинання

3 Опишемо якісно стан термодинамічної рівноваги між випромінюванням і речовиною. Досліджуємо перехід атомів між станами з енергіями  $E_n$  й  $E_m$  (див. рис. 21.2). Нехай  $N_n$  і  $N_m$  – число атомів у станах  $E_n$  і  $E_m$ , причому стани  $E_n$  й  $E_m$  можуть бути взяті якими завгодно з ряду припустимих станів. Середнє число переходів атомів зі стану  $E_n$  в стан  $E_m$  за одиницю часу через спонтанне випромінювання буде пропорційне вихідному числу атомів  $N_n$ . Подамо його у вигляді  $A_n^m N_n$ . Ейнштейн постулював, що через індуковане випромінювання середнє число переходів між тими самими рівнями буде як і раніше пропорційно  $N_n$ , а також спектральній густині випромінювання  $u(\omega_{mn})$  при частоті світла,

яка випромінюється у розглянутому переході. Позначимо це число через  $B_n^m N_n u(\omega_{mn})$ . Аналогічно, середнє число переходів з рівня  $E_m$  на рівень  $E_n$  через поглинання світла можемо подати як  $B_m^n N_m u(\omega_{mn})$ . Величини  $A_n^m$ ,  $B_n^m$ ,  $B_m^n$  називаються **коефіцієнтами Ейнштейна**. Вони є характеристиками тільки самого атома й можуть залежати лише від частоти  $\omega_{mn}$ .

4 Визначимо зв'язок між  $B_n^m$  і  $B_m^n$ . Припустимо, що поле випромінювання, у якому знаходяться атоми, рівноважне й має температуру  $T$ . Тоді має місце термодинамічна рівновага і тому

$$A_n^m N_n + B_n^m N_n u(\omega_{mn}) = B_m^n N_m u(\omega_{mn}). \quad (21.1)$$

Будемо підвищувати температуру системи. Коефіцієнти Ейнштейна при цьому змінюватися не будуть, тому що вони від температури не залежать. Спектральна густина електромагнітного випромінювання  $u(\omega_{mn})$  буде зростати. Тому спонтанне випромінювання (не залежить від  $u(\omega_{mn})$ ) буде відігравати все меншу й меншу роль у порівнянні з вимушеним. За умови  $T \rightarrow \infty$  ним можна знехтувати. Тоді умова детальної рівноваги при  $T \rightarrow \infty$  набере вигляду

$$B_n^m N_n u(\omega_{mn}) = B_m^n N_m u(\omega_{mn}). \quad (21.2)$$

Відповідно до формули Больцмана  $N = N_0 \exp(-E/(kT))$ . Тому

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{N_0 \exp(-E_n/(kT))}{N_0 \exp(-E_m/(kT))} = \exp -\frac{E_n - E_m}{kT} \rightarrow \exp -\frac{E_n - E_m}{\infty} = \exp(-0) = 1.$$

Тобто при  $T \rightarrow \infty$  заселеність рівнів  $N_n$ ,  $N_m$  повинна зрівнятися. Звідси й з формули (21.2) випливає, що

$$B_n^m = B_m^n. \quad (21.3)$$

Таким чином, існують три види переходу атомів: спонтанне випромінювання, вимушене (індуковане) поглинання, вимушене (індуковане) випромінювання. Ці переходи характеризуються коефіцієнтами Ейнштейна  $A_n^m$ ,  $B_n^m$ ,  $B_m^n$ , причому  $B_n^m = B_m^n$ .

## § 22 Інверсна заселеність. Лазери

1 В 50-х роках XX ст. були створені пристрої, при проходженні через які електромагнітні хвилі підсилюються за рахунок відкритого Ейнштейном вимушеного випромінювання. У 1953 р. Басовим і Прохоровим і незалежно від них Таунсом були створені перші молекулярні генератори, які працюють у діапазоні сантиметрових хвиль і які отримали назву мазерів. (У 1964 р. Басову, Прохорову й Таунсу за це була присуджена Нобелівська премія.) Слово «мазер» походить від перших букв англійської назви Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation (посилення мікрохвиль за допомогою вимушеного випромінювання).

У 1960 р. Мейманом був створений перший аналогічний прилад, що працює в оптичному діапазоні, – **лазер** (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation – посилення світла за допомогою вимушеного випромінювання). Лазери називають також **оптичними квантовими генераторами**. У цей час термін «лазер» поєднує в собі не тільки оптичні квантові генератори.

2 Лазер працює за **принципом індукованого випромінювання**. Припустимо, що на атом падає фотон з енергією  $\hbar\omega = E_2 - E_1$ , де  $E_2$  й  $E_1$  – деякі два енергетичні рівні атома. Якщо атом знаходиться на нижньому рівні  $E_1$ , то фотон, що падає на нього, може

поглинутися. Якщо ж атом знаходиться на верхньому рівні  $E_2$ , то може відбутися вимушений перехід на нижній рівень  $E_1$  із випромінюванням другого фотона. Індуковано випромінений фотон характеризується не тільки тією самою частотою  $\omega$  (як і при спонтанному випромінюванні), але також тими ж фазою, поляризацією й напрямком поширення. Замість одного падаючого фотона утворюється два тотожних фотони. Ця особливість індукованого випромінювання й використовується в лазерах.

Розглянемо тепер не одиничний атом, а середовище з атомів. Позначимо через  $N_1$  і  $N_2$  числа атомів в одиниці об'єму на рівнях  $E_1$  і  $E_2$  відповідно. Припустимо, що в середовищі поширюється плоска монохроматична хвиля, частота якого визначається умовою  $\hbar\omega = E_2 - E_1$ . За час  $dt$  із нижнього рівня на верхній переходить у середньому  $u(\omega)B_1^2 N_1 dt$  атомів і таке саме число фотонів поглинається. Через індуковане випромінювання з верхнього рівня на нижній перейде  $u(\omega)B_2^1 N_2 dt$  атомів і утвориться таке саме число фотонів тієї самої поляризації й напрямку поширення, що й у розглянутій хвилі. Фотони, які випромінені спонтанно, а також фотони, які індуковані іншими хвилями, можна не враховувати, тому що серед них тільки незначна частина поширюється в потрібному напрямку й має потрібну поляризацію. Збільшення числа фотонів в одиниці об'єму за час  $dt$  можна подати виразом

$$dN_{\text{фот}} = (B_2^1 N_2 - B_1^2 N_1) u(\omega) dt = B_2^1 (N_2 - N_1) u(\omega) dt. \quad (22.1)$$

Тут урахували, що коефіцієнти Ейнштейна  $B_1^2$  й  $B_2^1$  зв'язані співвідношенням  $B_1^2 = B_2^1$ . З (22.1) випливає, щоб хвиля підсилювалася ( $dN_{\text{фот}} > 0$ ), необхідне виконання умови

$$N_2 - N_1 > 0, \text{ або } N_2 > N_1. \quad (22.2)$$

У звичайних умовах, коли середовище перебуває в термодинамічній рівновазі, співвідношення (22.2) не виконується. Тобто має місце зворотне співвідношення  $N_2 < N_1$ , на кожному **простому верхньому рівні перебуває менше атомів, ніж на нижньому**. Це безпосередньо випливає з формули Больцмана

$$N = N_0 \exp(-E/(kT)). \quad \frac{N_1}{N_2} = \exp \left( -\frac{E_1 - E_2}{kT} \right) = \exp \frac{E_2 - E_1}{kT} > 1, \text{ тому що } E_2 > E_1.$$

Можна штучно отримати **термодинамічно нерівноважне середовище**, у якого виконується співвідношення (22.2). Таке середовище називається **активним**, або середовищем з **інверсною заселеністю відносно енергетичних рівнів**  $E_1$  і  $E_2$ . Отже, для посилення світлової хвилі необхідно, щоб середовище, у якому хвиля поширюється, було активним. Ідея використання індукованого випромінювання для посилення хвилі була вперше висловлена в 1939 р. В.А. Фабрикантом. У той час на ідею Фабриканта не було звернено належної уваги. Здавалося, що створення систем з інверсною заселеністю енергетичних рівнів – справа безперспективна.

Посилення світла в активному середовищі звичайно порівнюють зі сходженням лавини, зображуючи фотони у вигляді кульок. Фотон-кулька, яка летить, породжує другий фотон-кульку з переходом атома з верхнього рівня на нижній. Утворюються дві однакових кульки, що летять у попередньому напрямку, потім чотири кульки і т.д.

**3** Щоб активне середовище перетворити у генератор світлових коливань, необхідно здійснити **зворотний зв'язок** (другий принцип, що використовується під час роботи лазера). Ідея реалізації зворотного зв'язку вперше була висловлена в 1957 р. А.М. Прохоровим і Н.Г. Басовим і незалежно від них Ч. Таунсом. Необхідно, щоб частина випроміненого світла увесь час перебувала в зоні активної речовини й викликала вимушене випромінювання все нових і нових атомів. Для цього активну речовину поміщають між двома паралельними дзеркалами. Припустимо, наприклад, що воно являє собою циліндр, а площини дзеркал  $S_1$  і  $S_2$  перпендикулярні до осі цього циліндра (рис. 22.1).

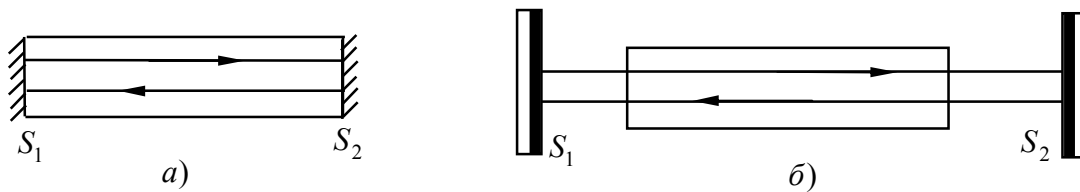


Рисунок 22.1

Тоді промінь світла, зазнаючи багаторазового відбиття від дзеркал  $S_1$  і  $S_2$ , буде проходити багато разів через активну речовину, підсилюючись при цьому в результаті вимушених переходів атомів з вищого енергетичного рівня  $E_2$  на більш низький рівень  $E_1$ .

Такий резонатор буде не тільки підсилювати світло, але також звужувати і монохроматизувати його. Для простоти припустимо спочатку, що дзеркала  $S_1$  й  $S_2$  ідеальні. Тоді промені, які паралельні осі циліндра, будуть проходити через активну речовину туди й назад необмежене число разів. Тоді промені, які поширюються похило, зрештою, потраплять на бічну стінку циліндра, де вони розсіються або вийдуть назовні. Зрозуміло, що максимально підсиляться промені, які поширюються паралельно осі циліндра. Цим і пояснюється колімація (зужування) променів.

Пояснимо тепер, як відбувається *монохроматизація світла*. Для простоти проведемо міркування стосовно до рис. 22.1а, коли роль дзеркал  $S_1$  і  $S_2$  виконують відполіровані й посріблені торці циліндра активної речовини, які перпендикулярні до його геометричної осі. Нехай  $L$  – довжина циліндра. Якщо  $2L = m\lambda$ , тобто на довжині  $L$  укладеться ціле число  $m$  напівхвиль, то світлова хвиля, вийшовши від  $S_1$ , після проходження через циліндр туди й назад повернеться до  $S_1$  у тій самій фазі. Така хвиля підсилиться при другому й всіх наступних проходженнях через активну речовину в прямому й зворотному напрямках. Ця хвиля буде підсилюватися максимально.

У реальному лазері частина світла виводиться назовні. Для цього одне із дзеркал роблять напівпрозорим.

**4 Рубіновий лазер.** Створення лазера стало можливим після того, як були знайдені способи здійснення інверсної заселеності рівнів у деяких речовинах. Перший квантовий генератор світла був створений в 1961 р. Мейманом на рубіні. Рубін – це твердий кристал, основою якого є корунд, тобто кристал окису алюмінію ( $Al_2O_3$ ), у якому невелика частина атомів алюмінію (близько 0,05%) заміщена іонами хрому  $Cr^{3+}$ . Іони хрому відіграють основну роль у роботі квантового генератора. Корунд – це діелектрик із широкою забороненою енергетичною зоною між валентною зоною й зоною провідності. Енергетичні рівні хрому в корунді лежать у цій забороненій зоні. Основним (незбудженим) рівнем є рівень  $E_1$  (рис. 22.2). Він має складну структуру, що, однак, не відіграє ролі в роботі квантового генератора. Вище лежать близькі збуджені рівні  $E_{2a}$  й  $E_{2b}$ . Це – поруч розміщені рівні. При переході з них на основний рівень  $E_1$  випромінюється червоне світло з довжинами хвиль  $\lambda=694,3$  і  $692,9$  нм. Він й надає рубіну характерне рожеве або червоне фарбування (залежно від концентрації іонів хрому). Більш інтенсивна лінія  $\lambda=694,3$  нм. Із цієї причини тільки вона й підсилюється при роботі лазера.

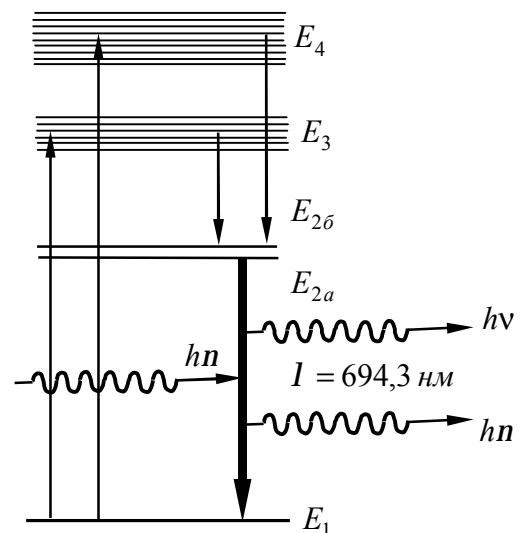


Рисунок 22.2

Друга лінія не відіграє ролі. Вище рівнів  $E_{2a}$  і  $E_{2b}$  розміщені дві порівняно широкі смуги енергій  $E_3$  і  $E_4$ .

Інверсна заселеність створюється між рівнями  $E_1$  й  $E_2$ . Для цього використовується так зване оптичне накачування, тобто освітлення кристала рубіна потужним спалахом світла. Рубіну надають форми циліндричного стрижня з діаметром 0,1-2 см і довжиною від 2 до 20 см і більше. Кінці стрижня ретельно відполіровані. Вони можуть бути дзеркалами. Тоді їх сріблять, як показано на рис. 22.1а. Дзеркала можуть бути й зовнішніми (рис. 22.1б), тоді сріблення не потрібно. Для висвітлення рубінового стрижня застосовують імпульсні ксенонові газорозрядні лампи, через які розряджаються батареї високовольтних конденсаторів (напруга 2-3 кВ). Тривалість спалаху порядку однієї мілісекунди.

Якщо б енергетичний спектр складався тільки із двох рівнів  $E_1$  і  $E_2$ , то за допомогою оптичного накачування створити інверсну заселеність було б неможливо. Дійсно, індуковані переходи атомів з нижнього рівня на верхній і назад ідуть із однаковими швидкостями. Тому лампа якнайбільше могла б лише зрівняти заселеності обох рівнів. Наявність же спонтанного випромінювання приводила б до збідніння (атомами) верхнього рівня в порівнянні з нижнім.

Положення змінюється завдяки наявності третього, широкого енергетичного рівня, що складається зі смуг  $E_3$  і  $E_4$ . Лампа переводить атоми хрому з незбудженого стану в збуджене, тобто в енергетичні смуги  $E_3$  й  $E_4$ . Значна ширина цих смуг має велике практичне значення. Лампа випромінює світло, близьке до білого. Якщо б рівні  $E_3$  й  $E_4$  були дуже вузькими, то лише незначна частина енергії лампи могла б бути використана на їх збудження. Завдяки ж значній ширині смуг  $E_3$  і  $E_4$  на їх збудження припадає 10–15% енергії випромінювання лампи. На рівнях  $E_3$  і  $E_4$  збуджені атоми хрому перебувають дуже короткий час ( $\sim 10^{-8}$  с). За цей час вони переходять на один з рівнів  $E_2$ . При такому переході атоми хрому не випромінюють, а витрачають свою енергію на збудження коливань кристалічної решітки. Можливість зворотного повернення атома зі смуг  $E_3$  і  $E_4$  на рівень  $E_1$  хоча й існує, але ймовірність такого процесу дуже мала в порівнянні з імовірністю переходу на рівні  $E_2$ . Рівні  $E_2$  метастабільні. Час життя атома на них  $\sim 10^{-3}$  с, що за атомними масштабами є дуже великим. Це дозволяє накопичувати атоми на рівнях  $E_2$ . Якщо переводити атоми з рівня  $E_1$  на рівні  $E_3$  й  $E_4$  досить швидко, то на рівень  $E_2$  можна перевести більше половини атомів хрому. Тоді на рівнях  $E_2$  виявиться більше атомів, ніж на рівні  $E_1$ , тобто виникне інверсна заселеність.

На наступному етапі роботи лазера відбувається перехід з рівня  $E_2$  на рівень  $E_1$ . Цей перехід використовується для генерації світла в рубіновому лазері.

**5** Випромінювання лазерів відрізняється рядом чудових особливостей. Для нього характерні: 1) велика монохроматичність ( $\Delta\lambda \sim 0,01$  нм); 2) висока часова й просторова когерентність; 3) велика інтенсивність і 4) вузькоспрямованість пучка. Кутова ширина світлового пучка, який генерується лазером, настільки мала, що, використовуючи телескопічне фокусування, можна отримати на місячній поверхні пляму світла діаметром усього лише 3 км. Велика потужність і вузькоспрямованість пучка дозволяють при фокусуванні за допомогою лінзи отримати густину потоку енергії, яка в 1000 разів перевищує густину потоку енергії, що можна отримати фокусуванням сонячного світла.

Лазери мають численні застосування. Вони використовуються у техніці для зварювання, різання й плавлення металів; у медицині – як безкровні скальпелі, при лікуванні очних і шкірних хвороб. Лазерна локація дозволила виміряти швидкість обертання планет, уточнити характеристики руху Місяця й планети Венера. Лазери використовуються також у різних приладах для тонких фізичних досліджень.

## ТЕМА 5 ЗОННА ТЕОРІЯ ТВЕРДИХ ТІЛ

### § 23 Енергетичні зони в кристалах. Зона провідності, заборонена зона, валентна зона. Метали, напівпровідники, діелектрики з точки зору зонної теорії

1 Виявляється, що в кристалі спектр можливих значень енергії електронів розпадається на ряд дозованих і заборонених зон (рис. 23.1). У межах дозованих зон енергія змінюється квазінеперервно. Значення енергії, що належать забороненим зонам, не можуть реалізуватися. Це пов'язане з тим, що на електрони в кристалі діє періодичне поле кристалічної решітки.

Щоб зрозуміти походження зон, розглянемо уявний процес об'єднання атомів у кристал. Нехай спочатку є  $N$  ізольованих атомів якої-небудь речовини. Поки атоми ізольовані один від одного, вони мають схеми енергетичних рівнів, які повністю збігаються. Заповнення рівнів електронами здійснюється в кожному атомі незалежно від заповнення аналогічних рівнів в інших атомах. Коли електрони об'єднуються в одну квантову систему, то між ними виникає взаємодія. Відповідно до принципу Паулі в одній і тій самій квантовій системі не може бути двох електронів, які перебувають в одному і тому самому квантовому стані. Таким чином, зі зближенням атомів між ними виникає взаємодія, що посилюється і яка приводить до зміни положення рівнів. Замість одного однакового для всіх атомів рівня виникають  $N$  дуже близьких рівнів, які не збігаються. Таким чином, кожний рівень ізольованого атома розщеплюється в кристалі на  $N$  густо розміщених рівнів, які утворюють **зону**.

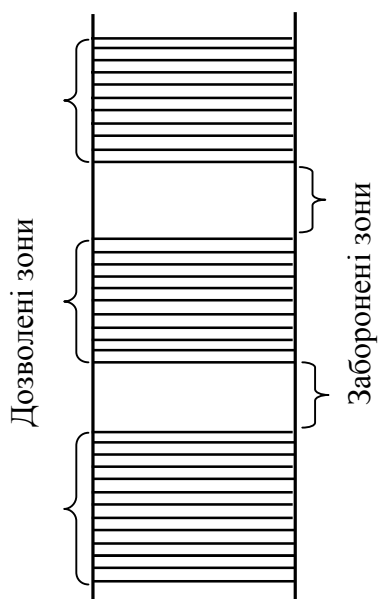


Рисунок 23.1 – Енергетичні зони в кристалі

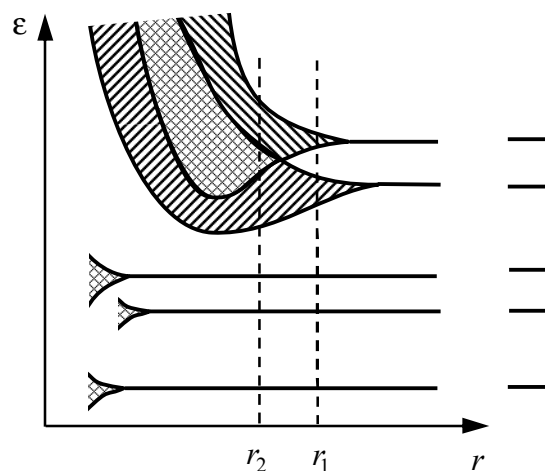


Рисунок 23.2 – Утворення енергетичних зон при зближенні атомів

Розщеплення різних рівнів не є однаковим. Сильніше всього збурюються рівні, заповнені в атомі зовнішніми електронами. Рівні, заповнені внутрішніми електронами, збурюються мало. На рис. 23.2 показане розщеплення рівнів як функції відстані  $r$  між атомами. зі схеми бачимо, що виникає в кристалі розщеплення рівнів, які зайняті внутрішніми електронами, дуже мале. Помітно розщеплюються лише рівні, які зайняті валентними електронами. Таке саме розщеплення відбувається й з більш високими рівнями, які не зайняті електронами в основному стані атома.

Залежно від конкретних властивостей атомів рівноважна відстань між сусідніми атомами в кристалі може бути або типу  $r_1$ , або типу  $r_2$  (див. рис. 23.2). При відстані типу  $r_1$  між дозованими зонами, яка виникає із сусідніх рівнів атома, існує заборонена зона. При

відстані типу  $r_2$  відбувається перекривання сусідніх зон. Число рівнів у такій об'єднаній зоні дорівнює сумі кількостей рівнів, на які розщеплюються обидва рівні атома.

Отже, спектр можливих значень енергії валентних електронів у кристалі розпадається на ряд **дозволених** і **заборонених зон**. Ширина зон не залежить від розмірів кристала. Вона залежить від кількості атомів у кристалі. Таким чином, чим більше атомів містить кристал, тим тісніше розміщуються рівні в зоні. Дозволені зони мають ширину порядку декількох електрон-вольт. Отже, якщо кристал містить  $10^{23}$  атомів, відстань між сусідніми рівнями в зоні становить приблизно  $10^{-23}$  еВ.

На кожному енергетичному рівні можуть знаходитися два електрони, які мають протилежно спрямовані спіни.

Існування енергетичних зон дозволяє пояснити з єдиної точки зору існування металів, напівпровідників і діелектриків.

Дозволену зону, яка виникла з того рівня, на якому знаходяться валентні електрони в основному стані атома, ми будемо називати **валентною зоною**. При абсолютному нулі валентні електрони заповнюють попарно нижні рівні валентної зони. Більш високі дозволені зони будуть вільними від електронів. Залежно від ступеня заповнення валентної зони й ширини забороненої зони можливі три випадки, які зображені на рис.23.3. У випадку *a* електрони заповнюють валентну зону не повністю. Тому досить передати електронам, які знаходяться на верхніх рівнях, зовсім невелику енергію ( $\sim 10^{-23} - 10^{-22}$  еВ) для того, щоб перевести їх на більш високі рівні. Енергія теплового руху ( $kT$ ) становить при  $1K$  величину порядку  $10^{-4}$  еВ. Отже, при температурах, відмінних від абсолютного нуля, частина електронів переводиться на більш високі рівні. Додаткова енергія, яка викликана дією на електрон електричного поля, також виявляється достатньою для переведення електрона на більш високі рівні. Тому електрони можуть прискорюватися електричним полем і отримувати додаткову швидкість у напрямку, протилежному до напрямку поля. Таким чином, кристал з подібною схемою енергетичних рівнів буде являти собою метал.

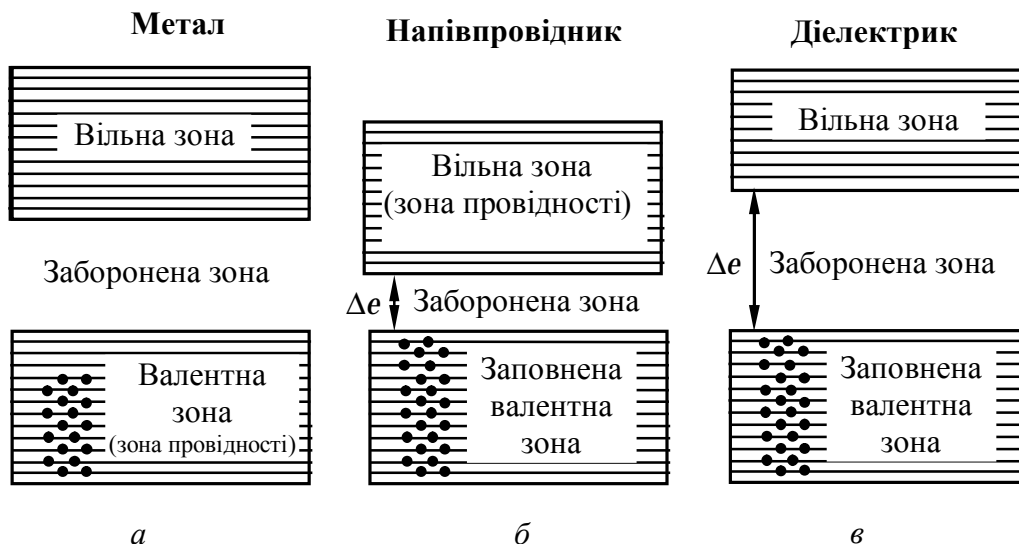


Рисунок 23.3 – Ширина забороненої зони визначає електричні властивості кристала

Часткове заповнення валентної зони (у випадку металу її називають також **зоною провідності**) спостерігається в тих випадках, коли на останньому зайнятому рівні в атомі знаходиться тільки один електрон або коли має місце перекривання зон (див. рис. 23.2, відстань  $r_2$ ). У першому випадку  $N$  електронів провідності заповнюють попарно тільки половину рівнів валентної зони. У другому випадку число рівнів у зоні провідності буде



більше  $N$ , так що, навіть якщо кількість електронів провідності дорівнює  $2N$ , вони не зможуть зайняти всі рівні зони.

У випадках *б* і *в* (див. рис. 23.3) рівні валентної зони повністю зайняті електронами – зона заповнена. Для того щоб збільшити енергію електрона, необхідно передати йому кількість енергії, не менше, ніж ширина забороненої зони  $\Delta\epsilon$ . Електричне поле (у всякому разі такої напруженості, при якій не відбувається електричний пробій кристала) передати електрону таку енергію не може. За цих умов електричні властивості кристала визначаються шириною забороненої зони  $\Delta\epsilon$ . Якщо ця ширина невелика (порядку декількох десятків електрон-вольт), енергія теплового руху виявляється достатньою для того, щоб перевести частину електронів у верхню вільну зону. Ці електрони будуть знаходитися в умовах, аналогічних тим, у яких знаходяться валентні електрони в металі. Вільна зона виявиться для них **зоною провідності**. Одночасно стане можливим перехід електронів валентної зони на її верхні рівні, які звільнилися. Така речовина називається **власним напівпровідником**.

Якщо ширина забороненої зони  $\Delta\epsilon$  велика (порядку декількох електрон-вольт), тепловий рух не зможе перекинути у вільну зону помітне число електронів. У цьому випадку кристал є діелектриком.

## § 24 Напівпровідники. Власні, домішкові напівпровідники. Рух електронів та дірок. Рівень Фермі. Залежність провідності власних напівпровідників від температури

**1 Напівпровідниками** є кристалічні речовини, у яких при  $0^\circ K$  валентна зона повністю заповнена електронами, а ширина забороненої зони невелика. Напівпровідники зобов'язані своєю назвою тій обставині, що за електропровідністю вони займають проміжне положення між металами й діелектриками. Однак характерним для них є не значення провідності, а те, що їх провідність збільшується з підвищенням температури (нагадаємо, що в металах вона зменшується).

Розрізняють **власні** й **домішкові** напівпровідники. До числа власних належать хімічно чисті напівпровідники. Електричні властивості домішкових напівпровідників визначаються наявними в них домішками, що вводяться штучно.

**2** При розгляді електричних властивостей напівпровідників велику роль відіграє поняття “**дірок**”. Зупинимося на з'ясуванні фізичного змісту цього поняття.

У власному напівпровіднику при абсолютному нулі всі рівні валентної зони повністю заповнені електронами, а в зоні провідності електрони відсутні (рис. 24.1*а*). Електричне поле не може перевести електрони з валентної зони в зону провідності. Тому власні

напівпровідники поведуться при абсолютному нулі як діелектрики. При температурах, відмінних від  $0^\circ K$ , частина електронів з верхніх рівнів валентної зони переходить у результаті теплового збудження на нижні рівні зони провідності (рис. 24.1*б*). У цих умовах електричне поле отримує можливість змінювати стан електронів, що знаходяться у зоні провідності. Крім того, внаслідок утворення вакантних рівнів у валентній зоні електрони цієї зони також можуть змінювати свою швидкість під впливом зовнішнього поля. У результаті електропровідність напівпровідника стає відмінною від нуля й визначається процесами двох типів: рухом вільних електронів у зоні провідності й рухом валентних електронів (зв'язаних електронів із кристалічною решіткою) у валентній зоні.

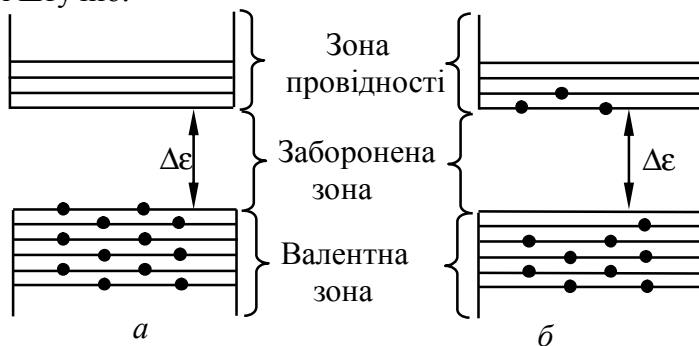


Рисунок 24.1 – Утворення вакантних рівнів у валентній зоні напівпровідника

Рух електронів різного типу має свої особливості. Щоб розрізняти ці два типи електронів, *рух валентних електронів ставлять у відповідність рух додатно заряджених квазічастинок із зарядом  $+e$ , які мають швидкість вакансії в кристалічній решітці. Ці квазічастинки отримали назву “дірок”, їх швидкість спрямована в протилежний бік відносно швидкості валентних електронів*. Електричний струм дірок дорівнює електричному струму валентних електронів. Про рух електронів, що відірвалися від кристалічної решітки (електронів у зоні провідності), говорять як про рух вільних електронів.

Підкреслимо, що рух дірки не є переміщенням якоїсь реальної додатно зарядженої частинки. Уявлення про дірки відображає характер руху валентних електронів у напівпровіднику.

**4 Власна провідність напівпровідників.** Власна провідність виникає в результаті переходу електронів з верхніх рівнів валентної зони у зону провідності. При цьому у зоні провідності з'являється деяке число носіїв струму – електронів, що займають енергетичні рівні поблизу дна зони; одночасно у валентній зоні звільняється таке саме число місць на верхніх рівнях, у результаті чого з'являються дірки.

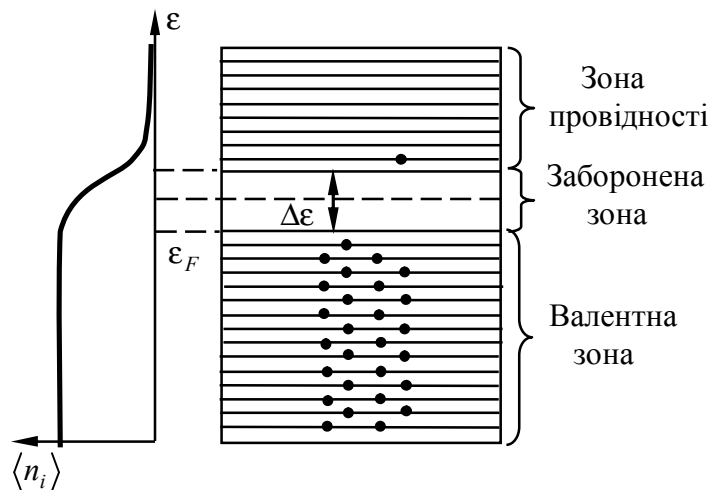


Рисунок 24.2 – Розподіл електронів по рівнях валентної зони й зони провідності у власному напівпровіднику

Розподіл електронів по енергетичних рівнях валентної зони й зони провідності описується не розподілом Больцмана, який використовується у класичній фізиці, а його аналогом у квантовій механіці – розподілом Фермі-Дірака, який є правильним для частинок з напівацілим спіном:

$$\langle n_i \rangle = \frac{2}{\exp[(\epsilon_i - \epsilon_F)/kT] + 1}. \quad (24.1)$$

Тут  $\langle n_i \rangle$  – середнє значення числа електронів на  $i$ -му енергетичному рівні;  $\epsilon_i$  – енергія  $i$ -го рівня;  $k$  – стала Больцмана;  $T$  – абсолютна температура;  $\epsilon_F$  – параметр системи, який називається енергією Фермі. **Енергією Фермі** називають таку енергію, імовірність знаходження частинки з якою дорівнює 0,5. У формулі (24.1) також враховано, що на кожному енергетичному рівні можуть знаходитися два електрони, які відрізняються один від одного орієнтацією спіну.

Розподіл Фермі можна зробити наочним, зобразивши, як це зроблено на рис. 24.2, графік функції розподілу разом зі схемою енергетичних зон.

Відповідний розрахунок дає, що у власних напівпровідниках енергія Фермі, яка відрахована відносно верхнього краю валентної зони, дорівнює

$$\epsilon_F \approx \frac{1}{2} \Delta\epsilon, \quad (24.2)$$

де  $\Delta\epsilon$  – ширина забороненої зони. Це означає, що рівень Фермі лежить посередині забороненої зони (див. рис. 24.2). Отже, для електронів, які перейшли в зону провідності, величина  $\epsilon_i - \epsilon_F$ , що входить у формулу (24.1), мало відрізняється від половини ширини забороненої зони.

Рівні зони провідності лежать на “хвості” кривої розподілу (див. рис. 24.2). Тому середні числа заповнення для них малі в порівнянні з одиницею. У цьому випадку одиницею в знаменнику розподілу (24.1) можна знехтувати й вважати, що

$$\langle n_i \rangle \approx 2 \exp[-(\epsilon_i - \epsilon_F)/kT] \quad (24.3)$$

Поклавши в цій формулі  $\epsilon_i - \epsilon_F \approx \Delta\epsilon/2$ , отримаємо, що

$$\langle n_i \rangle \approx 2 \exp(-\Delta\epsilon/2kT). \quad (24.4)$$

Кількість електронів, які перейшли в зону провідності, а отже, і кількість дірок, які утворилися, будуть пропорційні виразу (24.4). Ці електрони й дірки є носіями електричного струму. Оскільки провідність пропорційна числу носіїв, вона також повинна бути пропорційна виразу (24.4). Тобто  $\sigma = e_{\alpha} n_{\alpha} v_{\alpha}$ ,  $n_e \sim \langle n_i \rangle$ ,  $n_d \sim \langle n_i \rangle$ . Отже  $\sigma \sim \langle n_i \rangle$ . Таким

чином, електропровідність власних напівпровідників швидко збільшується з температурою, змінюючись за законом

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta\epsilon/2kT), \quad (24.5)$$

де  $\Delta\epsilon$  – ширина забороненої зони;  $\sigma_0$  – величина, що змінюється з температурою набагато повільніше, ніж експонента, у зв'язку із чим її можна в першому наближенні вважати константою.

Якщо на графіку відкласти залежність  $\ln \sigma$  від  $1/T$ , то для власних напівпровідників отримуємо пряму лінію, яка зображена на рис. 24.3. За нахилом цієї прямої можна визначити ширину забороненої зони  $\Delta\epsilon$ .

5 Типовими напівпровідниками є елементи IV групи періодичної системи Менделєєва – германій і кремній. Вони утворюють решітку типу алмаза, у якій кожний атом зв'язаний ковалентними (парноелектронними) зв'язками із чотирма рівновіддаленими від нього сусідніми атомами. Умовно таке взаємне розміщення атомів можна подати у вигляді плоскої структури, яка зображена на рис. 24.4. Кружки зі знаком «+» позначають додатно заряджені атомні залишки (тобто ту частину атома, що залишається після видалення валентних електронів), кружки зі знаком «-» – електрони, подвійні лінії – ковалентні зв'язки.

При досить високій температурі тепловий рух може розірвати окремі пари, звільнивши один електрон. Покинута електроном місце перестає бути нейтральним, у його околі виникає надлишковий додатний заряд  $+e$ , тобто утвориться дірка (на рис. 24.4 вона зображена пунктирним кружком). На це місце може перескочити електрон однієї із сусідніх пар (валентний електрон). У результаті дірка починає також мандрувати по кристалу, як і електрон, що вивільнився (вільний електрон).

Під час зустрічі вільного електрона з діркою вони **рекомбінують** (з'єднуються). Це означає, що електрон нейтралізує надлишковий додатний заряд, який розміщений біля дірки, і втрачає можливість пересуватись доти, поки знову не отримає від кристалічної решітки енергію, достатню для свого вивільнення. Рекомбінація приводить до одночасного зникнення вільного електрона й дірки. На схемі рівнів (рис. 24.2) процесу рекомбінації відповідає перехід електрона із зони провідності на один з вільних рівнів валентної зони.

Отже, у власному напівпровіднику проходять одночасно два процеси: народження попарно вільних електронів і дірок та рекомбінація, що призводить до попарного зникнення електронів і дірок. Імовірність першого процесу швидко зростає з температурою. Імовірність рекомбінації пропорційна як числу вільних електронів, так і числу дірок. Отже, кожній температурі відповідає певна рівноважна концентрація електронів і дірок, яка змінюється з температурою пропорційно виразу (24.4).

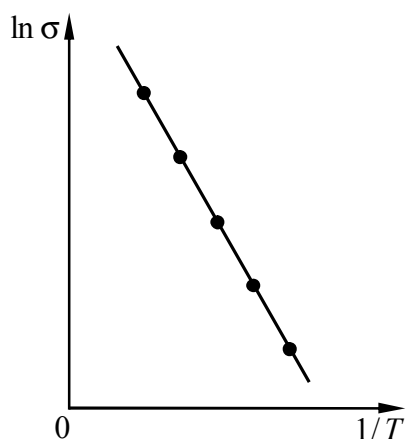


Рисунок 24.3 – Температурна залежність власної провідності напівпровідника

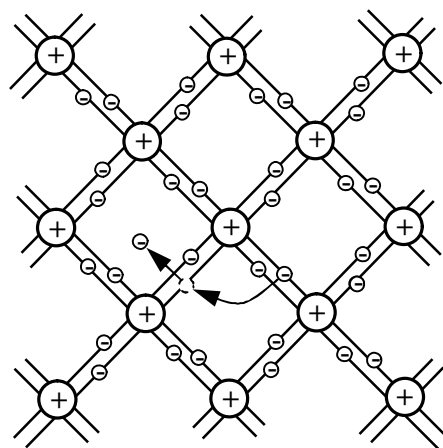


Рисунок 24.4 – Умовна схема кристала типу алмаза. Тут дірка зображена пунктирним кружком

Коли зовнішнє електричне поле відсутнє, електрони провідності й дірки рухаються хаотично. При увімкненні поля на хаотичний рух накладається впорядкований рух: електронів проти поля й дірок – у напрямку поля. Обидва рухи – і дірок, і електронів – приводять до перенесення заряду вздовж кристала. Отже, власна електропровідність обумовлюється ніби носіями заряду двох знаків – від'ємними електронами й додатними дірками.

Відзначимо, що при досить високій температурі власна провідність спостерігається в усіх без винятку напівпровідниках. Однак у напівпровідниках, які містять домішки, електропровідність складається із власної й домішкової провідності.

## § 25 Домішкова провідність напівпровідників. Донорні рівні, акцепторні рівні

1 Домішкова провідність виникає, якщо деякі атоми напівпровідника замінити у вузлах кристалічної решітки атомами, валентність яких відрізняється на одиницю від валентності основних атомів. На рис. 25.1 умовно зображена решітка германію з домішкою п'ятивалентних атомів фосфору. Для утворення ковалентних зв'язків із сусідами атому фосфору достатньо чотирьох електронів. Отже, п'ятий валентний електрон виявляється, ніби зайвим, і легко від'єднується від атома за рахунок енергії теплового руху, створюючи вільний електрон.

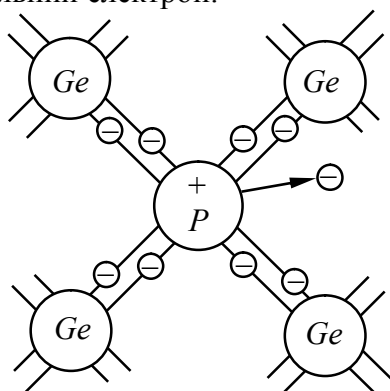


Рисунок 25.1 – Решітка германію з домішкою п'ятивалентних атомів фосфору

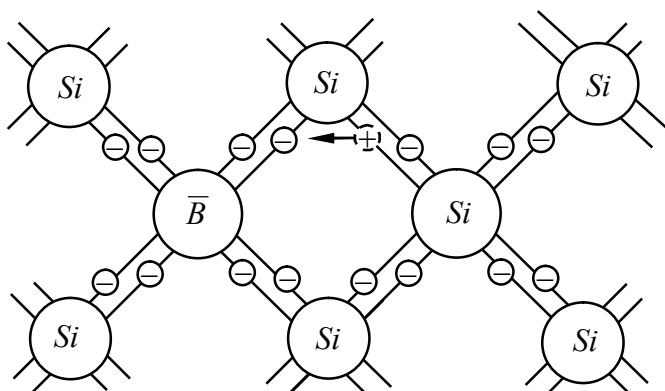


Рисунок 25.2 – Решітка кремнію з домішкою тривалентних атомів бору

У цьому випадку утворення вільного електрона не супроводжується розривом ковалентних зв'язків, тобто утворенням дірки. Хоча біля атома домішки виникає надлишковий додатний електричний заряд, але він пов'язаний із цим атомом і переміщатися

у решітці не може. Завдяки цьому заряду атом домішки може захопити електрон, що наблизився до нього, але зв'язок захопленого електрона з атомом буде неміцним й легко може бути зруйнованим знову за рахунок теплових коливань решітки.

Таким чином, у напівпровіднику з домішкою, валентність якої на одиницю більша валентності основних атомів, є тільки один вид носіїв струму – електрони. Тому говорять, що такий напівпровідник має електронну провідність, або є **напівпровідником *n*-типу** (від слова negative – від'ємний). Атоми домішки, що поставляють електрони провідності, називаються **донорними**.

2 Тепер розглянемо випадок, коли валентність домішки на одиницю менша валентності основних атомів. На рис. 25.2 умовно зображена решітка кремнію з домішкою тривалентних атомів бору. Тривалентних електронів атома бору недостатньо для утворення зв'язків з усіма чотирма сусідами. Тому один зі зв'язків виявиться неukoмплектованим й буде являти собою місце, здатне захопити електрон. При переході на це місце електрона однієї із сусідніх пар (ковалентного зв'язку) виникне дірка, що буде переміщуватися у кристалі. Поблизу атома домішки виникне надлишковий від'ємний заряд, але він буде пов'язаний з даним атомом і не може стати носієм струму.

Таким чином, у напівпровіднику з домішкою, валентність якої на одиницю менша валентності основних атомів, виникають носії струму тільки одного виду – дірки. Провідність у цьому випадку називається дірковою, а про **напівпровідник говорять, що він належить до *p*-типу** (від слова positive – додатний). Домішки, що викликають виникнення дірок, називаються **акцепторними**.

3 Домішки змінюють поле решітки, що приводить до виникнення на енергетичній схемі **домішкових рівнів**, розміщених у забороненій зоні кристала. У випадку напівпровідників *n*-типу домішкові рівні називаються **донорними** (рис. 25.3а), у випадку напівпровідників *p*-типу – **акцепторними** (рис. 25.3б).

Рівень Фермі в напівпровідниках *n*-типу розміщується у верхній половині забороненої зони, а в напівпровідниках *p*-типу – у нижній половині забороненої зони. При підвищенні температури рівень Фермі в напівпровідниках обох типів зміщуються до середини забороненої зони.

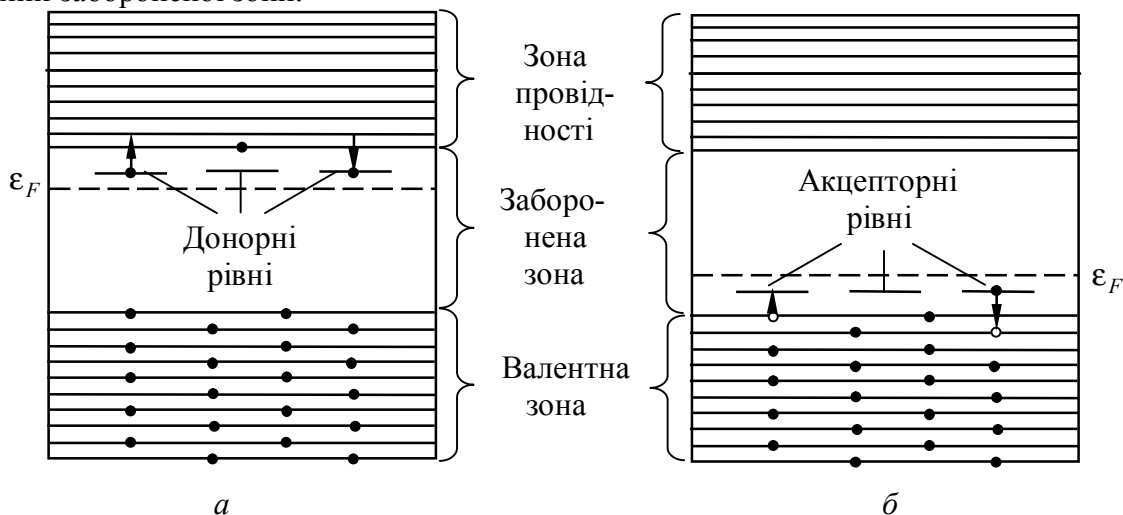


Рисунок 25.3 – Схема енергетичних рівнів напівпровідника *n*-типу (а) і *p*-типу (б)

Якщо донорні рівні розміщені недалеко від верхньої межі валентної зони, вони не можуть істотно вплинути на електричні властивості кристала. Інакше відбувається, коли відстань таких рівнів від дна зони провідності набагато менше ширини забороненої зони. У цьому випадку енергія теплового руху навіть при звичайних температурах виявляється достатньою для того, щоб перевести електрон з донорного рівня в зону провідності (див. рис. 25.3а). Цьому процесу відповідає відщеплення п'ятого валентного електрона від атома

домішки. Захопленню вільного електрона атомом домішки відповідає на рис. 25.3 перехід електрона із зони провідності на один з донорних рівнів.

Акцепторні рівні впливають на електричні властивості кристала в тому випадку, якщо вони розміщені недалеко від межі валентної зони (див. рис. 25.3б). Утворенню дірки відповідає перехід електрона з валентної зони на акцепторний рівень. Зворотний перехід відповідає розриву однієї із чотирьох ковалентних зв'язків атома домішки з його сусідами й рекомбінації електрона, що утворився при цьому, і дірки.

При підвищенні температури концентрація домішкових носіїв струму швидко досягає насичення. Це означає, що практично звільняються всі донорні або заповнюються електронами всі акцепторні рівні. Разом з тим зі збільшенням температури все більшою мірою починає позначатися власна провідність напівпровідника, обумовлена переходом електронів безпосередньо з валентної зони в зону провідності. Таким чином, при високих температурах провідність напівпровідника буде складатися з домішкової й власної провідностей. При низьких температурах переважає домішкова, а при високих – власна провідність.

## § 26 Контакт електронного та діркового напівпровідників. Електричне поле $p$ - $n$ -переходу. Потенціальний бар'єр $p$ - $n$ -переходу. Вольт-амперна характеристика. Напівпровідниковий діод

1 Контакт напівпровідників різного типу, який називається  **$p$ - $n$ -переходом**, лежить в основі пристроїв, які отримали назву транзисторів та напівпровідникових діодів. Цей перехід являє собою тонкий шар на межі між двома областями одного і того самого кристала, які відрізняються типом домішкової провідності. Для виготовлення такого переходу беруть, наприклад, монокристал із дуже чистого германію з електронним механізмом провідності (обумовленим незначними залишками домішок). У вирізану із кристала тонку пластинку вплавають із одного боку шматочок індію. Під час цієї операції, що здійснюється у вакуумі або в атмосфері інертного газу, атоми індію дифундують у германій на деяку глибину. У тій області, в яку проникають атоми індію, провідність германію стає дірковою. На межі цієї області виникає  $p$ - $n$ -перехід. Існують й інші способи отримання  $p$ - $n$ -переходів.

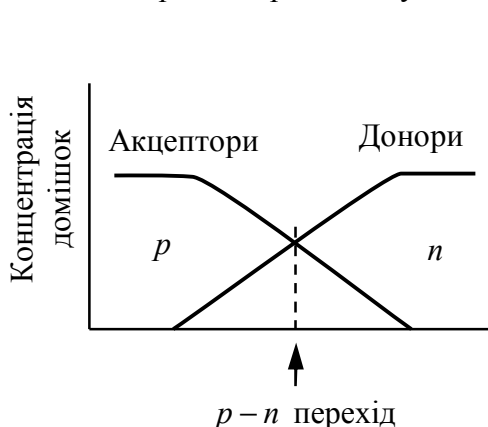


Рисунок 26.1 – Зміна концентрації акцепторних та донорних домішок в області  $p$ - $n$ -переходу

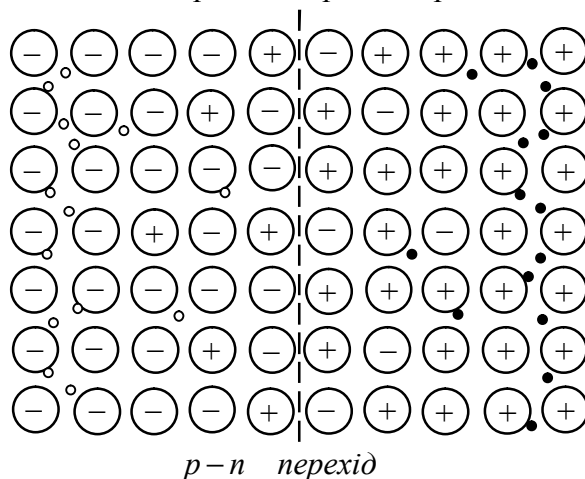


Рисунок 26.2 – Розподіл акцепторів і донорів біля  $p$ - $n$ -переходу. Більші кружки зі знаком плюс або мінус – іони, малі кружки – дірки, чорні точки – електрони

2 На рис. 26.1 показано хід концентрації домішок у напрямку, перпендикулярному до межі напівпровідників різного типу. В  $p$ -області основними носіями струму є дірки, що утворилися в результаті захоплення електронів атомами домішки; акцептори при цьому стають від'ємними іонами (рис. 26.2). Крім того, в  $p$ -області є невелике число неосновних носіїв – електронів, що виникають внаслідок переведення тепловим рухом електронів з

валентної зони безпосередньо в зону провідності (цей процес трохи збільшує й число дірок). У  $n$ -області основні носії струму – електрони, які передані донорами в зону провідності (донори при цьому перетворюються в додатні іони); перехід електронів, який відбувається за рахунок теплового руху, з валентної зони в зону провідності приводить до утворення невеликого числа дірок – неосновних носіїв для цієї області.

Дифундуючи у зустрічних напрямках через межовий шар, дірки й електрони рекомбінують один з одним. Тому  $p-n$ -перехід стає сильно збідненим носіями струму й отримує великий опір. Одночасно на межі між областями виникає подвійний електричний шар, утворений від'ємними іонами акцепторної домішки, заряд яких тепер не компенсується дірками, і додатними іонами донорної домішки, заряд яких тепер не компенсується електронами (див. рис. 26.2). **Електричне поле** у цьому шарі спрямоване так, що протидіє подальшому переходу через шар основних носіїв. Рівновага досягається при такій напруженості електричного поля, коли перехід основних носіїв струму через  $p-n$  перехід за рахунок дифузії припиняється.

З точки зору зонної теорії рівноважний стан на  $p-n$  переході досягається при такій висоті потенціального бар'єра, при якій рівні Фермі обох областей розміщуються на однаковій висоті (рис. 26.3).

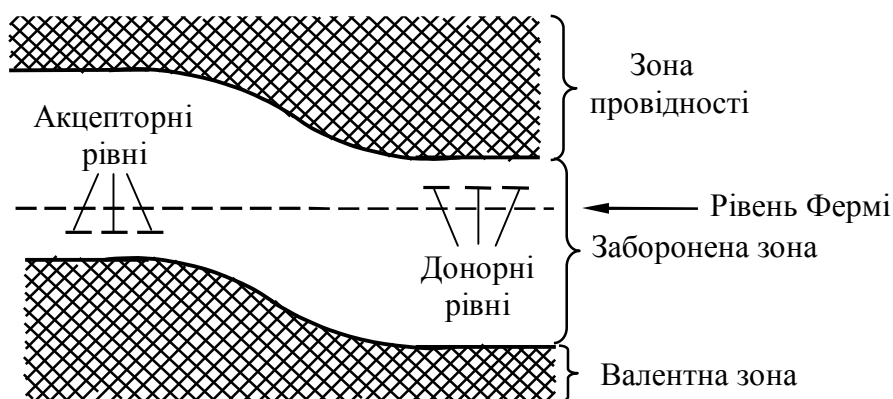


Рисунок 26.3 – Згинання енергетичних зон в області  $p-n$ -переходу

Згинання енергетичних зон в області переходу викликане тим, що потенціал  $p$ -області в стані рівноваги нижчий, ніж потенціал  $n$ -області; відповідно потенціальна енергія електрона в  $p$ -області більша, ніж в  $n$ -області. Нижня межа валентної зони дає хід потенціальної енергії електрона в напрямку, перпендикулярному до переходу (див. рис. 26.3). Заряд дірок протилежний заряду електрона, тому їх потенціальна енергія більша там, де менше енергія електрона, і навпаки.

У стані рівноваги деякій кількості основних носіїв вдається перебороти потенціальний бар'єр, внаслідок чого через перехід проходить невеликий струм  $I_{осн}$  (рис. 26.4а). Цей струм компенсується зустрічним струмом  $I_{неосн}$ , обумовленим неосновними носіями. Неосновних носіїв дуже мало, але вони легко проникають через межу областей, «скочуючись» з потенціального бар'єра. Величина  $I_{неосн}$  визначається числом неосновних носіїв, що народжуються за одиницю часу, і від висоти потенціального бар'єра майже не залежить. Величина  $I_{осн}$ , навпроти, сильно залежить від висоти бар'єра. Рівновага встановлюється саме при такій висоті потенціального бар'єра, при якій обидва струми  $I_{осн}$  й  $I_{неосн}$  компенсують один одного.

4 Подамо на кристал зовнішню напругу такого напрямку, щоб плюс був під'єднаний до  $p$ -області, а мінус – до  $n$ -області (така напруга називається прямою). Це приведе до

зростання потенціалу  $p$ -області й зниженню потенціалу  $n$ -області. У результаті висота потенціального бар'єра зменшиться й струм  $I_{осн}$  зросте. Струм же  $I_{неосн}$  залишиться практично без змін (він, як відзначалося, від висоти бар'єра майже не залежить). Отже, результуючий електричний струм буде відмінним від нуля. Зниження потенціального бар'єра пропорційне прикладеній напрузі (вона дорівнює  $eU$ ). При зменшенні висоти бар'єра струм основних носіїв, а отже, і результуючий струм швидко зростають. Таким чином, у напрямку від  $p$ -області до  $n$ -області  $p-n$ -перехід пропускає струм, сила якого швидко зростає при збільшенні прикладеної напруги. Цей напрям називається *прямим (або пропускним, або прохідним)*.

5 На рис. 26.4 наведена вольт-амперна характеристика  $p-n$ -переходу. Виникає в кристалі при прямій напрузі електричне поле “підтискує” основні носії до межі між областями, внаслідок чого ширина перехідного шару, збідненого носіями, скорочується. Відповідно зменшується й опір переходу, причому тим сильніше, чим більша напруга. Тому вольт-амперна характеристика в пропускній області не є прямою (див. праву гілку кривої на рис. 26.4).

Тепер прикладемо до кристала напругу такого напрямку, щоб плюс був під'єднаний до  $n$ -області, а мінус – до  $p$ -області (така напруга називається зворотною). Це приведе до підвищення потенціального бар'єра й відповідного зменшення струму основних носіїв  $I_{осн}$ . Виникаючий при цьому результуючий струм (називаний зворотним) швидко досягає насичення (тобто перестає залежати від  $U$ ) і дорівнює  $I_{неосн}$ . Таким чином, у напрямку від  $n$ -області до  $p$ -області (який називається зворотнім або запірним)  $p-n$ -перехід пропускає слабкий струм, цілком обумовлений неосновними носіями. Лише при дуже великій зворотній напрузі сила струму починає різко зростати, що обумовлено електричним пробоем переходу (див. ліву гілку на рис. 26.4). Кожний  $p-n$ -перехід характеризується своїм граничним значенням зворотної напруги, яку він здатний витримати без руйнування.

З рис. 26.4 випливає, що  $p-n$ -перехід має у зворотному напрямку набагато більший опір, ніж у прямому. Це пояснюється тим, що поле, яке виникає у кристалі при накладенні зворотної напруги, «відтягає» основні носії від межі між областями, що приводить до зростання ширини перехідного шару, збідненого носіями. Відповідно збільшується й опір переходу.

Неоднаковість опору в прямому й зворотному напрямках дозволяє використовувати  $p-n$  переходи для випрямлення змінного струму. На рис. 26.5 показаний графік струму, який проходить через перехід, коли прикладена напруга змінюється за гармонічним законом. У цьому випадку ширина шару, збідненого носіями, і опір переходу пульсують, змінюючись у такт зі змінами напруги.

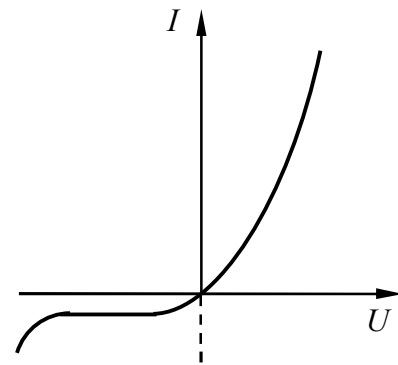


Рисунок 26.4 – Вольт-амперна характеристика  $p-n$ -переходу

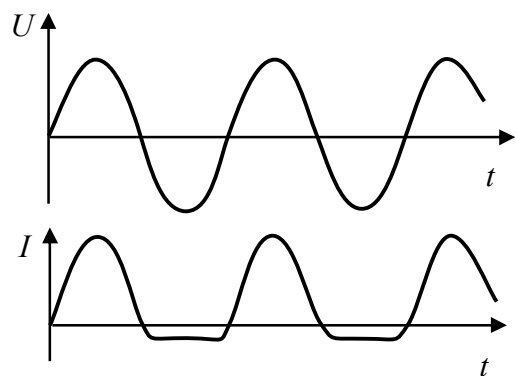


Рисунок 26.5 – Випрямлення змінного струму за допомогою  $p-n$ -переходу

## § 27 Транзистор. База, емітер, колектор. Транзисторний підсилювач напруги

1 Напівпровідниковий тріод, або **транзистор**, являє собою кристал із двома  $p-n$ -переходами. Залежно від порядку, у якому чергуються області з різними типами



провідності, розрізняють  $n-p-n$  і  $p-n-p$ -транзистори. Середня частина транзистора називається його **базою**. Прилягаючі до бази по обидва боки області з іншим, ніж у неї, типом провідності утворюють **емітер** та **колектор**.

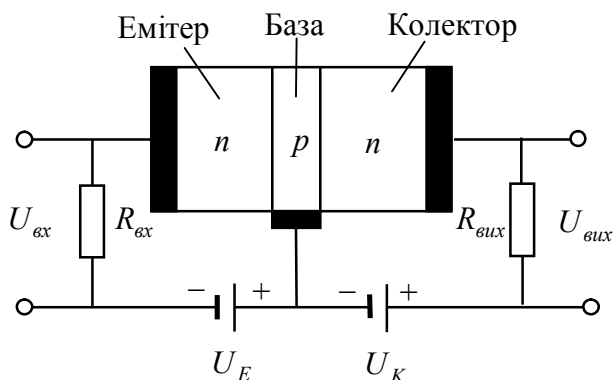


Рисунок 27.1

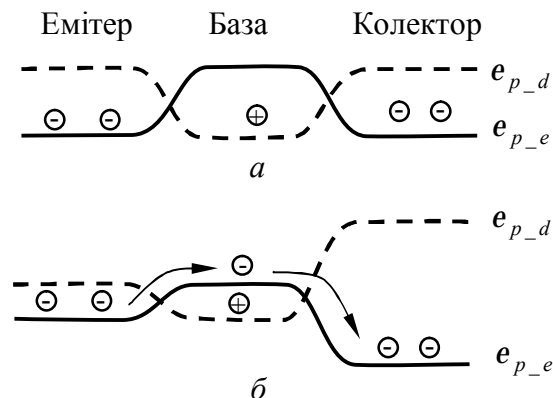


Рисунок 27.2

2 Розглянемо принцип роботи транзистора типу  $n-p-n$ . На рис. 27.1 показана схема **транзисторного підсилювача напруги** (можливі й інші схеми увімкнення транзистора). На перехід емітер-база подається постійна напруга  $U_E$  у прямому напрямку, а на перехід база-колектор – постійна напруга  $U_K$  у зворотному напрямку. Підсилювана змінна напруга  $U_{вх}$  подається на невеликий вхідний опір  $R_{вх}$ . Підсилена напруга  $U_{вих}$  знімається з вихідного опору  $R_{вих}$ . При зазначених на схемі знаках напруг опір переходу емітер – база невеликий, опір же переходу база – колектор, навпроти, дуже великий. Це дозволяє взяти як  $R_{вих}$  опір великої величини.

На рис. 27.2а показаний хід потенціальної енергії електронів (суцільна крива) і дірок (пунктирна крива) у випадку, що коли напруги й вхідний сигнал відсутні. Під'єднання прямої напруги  $U_E$  знижує потенціальний бар'єр на першому переході, а під'єднання зворотної напруги  $U_K$  підвищує потенціальний бар'єр на другому переході (рис. 27.2б). Проходження струму в колі емітера супроводжується проникненням електронів в область бази. Електрони, які проникнули в базу, дифундують у напрямку колектора. Якщо товщина бази невелика майже всі електрони, не встигають рекомбінувати, «скочуються» з потенціальної гірки, яка знаходиться на межі база – колектор, і надходять у коло колектора.

Обумовлена вхідною напругою зміна струму  $I_E$  в колі емітера приводить до зміни кількості електронів, які проникають у колектор, і, отже, до майже такої самої зміни струму  $I_K$  в колі колектора. Припустимо, що  $I_K \approx I_E$ . Виразивши ці струми через відповідні напруги й опори, отримаємо, що  $U_{вх} / R_{вх} \approx U_{вих} / R_{вих}$ . Звідси

$$U_{вих} : R_{вх} \approx U_{вих} : R_{вих}.$$

Оскільки  $R_{вих} \gg R_{вх}$ , напруга  $U_{вих}$  значно перевершує вхідну напругу  $U_{вх}$ . Таким чином, транзистор підсилює напругу й потужність. Підвищена потужність з'являється за рахунок джерела струму, увімкнутого в коло колектора.

**Возняк О.М., Салій Я.П., Фреїк Д.М.,  
Чобанюк В.М.**

## **Курс загальної фізики**

**Атомна і ядерна фізика  
Практикум розв'язування задач**

Міністерство освіти і науки України  
Прикарпатський університет  
імені Василя Стефаника  
кафедра фізики твердого тіла

**Возняк О.М., Салій Я.П., Фреїк Д.М.,  
Чобанюк В.М.**

## **Курс загальної фізики**

### **Атомна і ядерна фізика Практикум розв'язування задач**

Для студентів фізичних та природничих  
спеціальностей вищих навчальних закладів

Івано-Франківськ

2002

УДК 371.214.112+53.01

ББК 22.38.

В80

Курс загальної фізики. Атомна і ядерна фізика. Практикум розв'язування задач / Возняк О.М., Салій Я.П., Фреїк Д.М., Чобанюк В.М. – Івано-Франківськ, Прикарпатський університет імені Василя Стефаника: «Плай» – 2002 р. – 72 с.

До усіх розділів курсу атомної та ядерної фізики наведено короткий виклад теоретичного матеріалу, приклади розв'язування типових задач та умови задач для самостійної роботи. Пропонується близько 200 задач різного ступеня складності. Віддано перевагу не абстрактним, а реальним задачам з практичним змістом. У кінці посібника наведені відповіді до задач, а також додатки із табличними даними.

Для студентів і викладачів фізичних спеціальностей вищих навчальних закладів III і IV ступеня акредитації. Може бути використаний студентами природничих та технічних спеціальностей.

Іл. 12. Бібліографія 14.

Затверджено Вченою Радою Прикарпатського університету  
імені Василя Стефаника  
(Протокол № 3 від 29 жовтня 2002 р.)

Рецензенти: Климишин І.А. – д-р фіз.-мат. наук, проф.  
Прокопів В.В. – канд. фіз.-мат. наук, доц.

© О.М. Возняк, Я.П. Салій, Д.М. Фреїк, В.М. Чобанюк

ISBN 966-640-88-у

## Зміст

<b>Вступ</b> . . . . .	5
<i><b>Частина 1. Модель атома Резерфорда-Бора</b></i> . . . . .	7
<i><b>Частина 2. Хвильові властивості частинок</b></i> . . . . .	18
<i><b>Частина 3. Основи квантової механіки</b></i> . . . . .	23
<i><b>Частина 4. Будова багато електронних атомів і молекул</b></i> . . . . .	29
<b>Відповіді</b> . . . . .	56
<b>Додатки</b> . . . . .	64



## ВСТУП

В системі університетської фізичної освіти, розв'язування задач є чи не найістотнішим чинником засвоєння матеріалу. На важливість ролі задач при вивченні фізики вказував, зокрема, Л. Ландау, який у листі-відповіді студенту одного із вузів радив: “Головну роль при вивченні повинен відігравати не підручник, а задачник, який – не дуже важливо, необхідно лише, щоб він містив досить багато задач”. Важливо розв'язувати задачі самостійно, оскільки саме в цьому випадку настирливі намагання знайти розв'язок дають найбільшу користь, бо змушують поглиблено і детально вникати у відповідну проблему.

Автори практикуму пропонують понад 200 задач з курсу атомної та ядерної фізики. На відміну від інших розділів фізики (механіки, електродинаміки, молекулярної фізики), законам яких підлягає (з тою чи іншою точністю) широкий клас фізичних явищ і об'єктів, розділи атомної і ядерної фізики розглядають вузький клас специфічних об'єктів: молекули, атоми, атомні ядра та елементарні частинки, поведінка яких визначається основними законами фізики. Спільною рисою цих об'єктів є лише те, що вони – квантові і переважно релятивістські. Крім цього, переважна більшість задач цих розділів вимагає одержання відповіді у числовій формі, оскільки розв'язку в загальному вигляді здебільшого недостатньо. Це вимагає значно чіткішого уявлення про порядки фізичних величин, більшого обсягу знань про універсальні фізичні сталі і поглибленого вміння користуватися довідковими матеріалами.

У цьому збірнику, для зручності й економії часу студентів, на початку кожного розділу подано короткі теоретичні відомості про основні закони і формули, яких переважно достатньо для розв'язування задач. Усі формули в основному тексті і у відповідях наведено у системі СІ та додатково деякі у системі одиниць Гаусса. Числові відповіді до задач подано з урахуванням точності вихідних даних і правил дій з наближеними числами. У кожному розділі є також приклади розв'язків типових задач та умови задач для самостійної роботи. Відповіді до задач, а також таблиці необхідних довідкових даних подано наприкінці збірника.

Розв'язуючи задачі, доцільно керуватися такими правилами:

1. Насамперед глибоко вникніть в умову задачі і намагайтеся встановити, на яких фізичних закономірностях вона базується.

2. Встановіть, чи наведено всі дані, необхідні для розв'язування задачі. Відсутні дані можна знайти у таблицях додатків. Якщо дозволяє умова задачі, обов'язково зробіть схематичний рисунок, що

пояснює її суть, – це у багатьох випадках значно полегшує як пошук розв'язку, так і сам розв'язок.

3. Кожну задачу розв'яуйте, як правило, у загальному вигляді (тобто у символічних позначеннях), щоб шукана величина була виражена через задані величини. Розв'язок у загальному вигляді надає кінцевому результату особливу цінність, бо дозволяє встановити певну закономірність, демонструючи, як шукана величина залежить від заданих величин. Крім цього, відповідь, знайдена у загальному вигляді, дозволяє оцінити правильність самого розв'язку.

4. Одержавши розв'язок у загальному вигляді, перевірте, чи він має правильну розмірність. Неправильна розмірність є явною ознакою його хибності. Якщо можливо, дослідіть поведінку розв'язку у граничних частинних випадках.

5. Розпочинаючи обчислення, пам'ятайте, що числові значення фізичних величин завжди є наближеними. Тому при розрахунках керуйтеся правилами дій з наближеними числами. Зокрема, в одержаному значенні слід зберегти останнім той знак, одиниця якого ще перевищує похибку обчисленої величини. Всі наступні цифри потрібно відкинути.

6. Одержавши числову відповідь, оцініть її правдоподібність. Така оцінка у багатьох випадках може виявити хибність знайденого результату.



## I. МОДЕЛЬ АТОМА РЕЗЕРФОРДА-БОРА

Найважливіші поняття, закони і формули

Кут розсіювання  $\theta$  зарядженої частинки кулонівським полем нерухомого ядра визначається формулою:

$$\operatorname{tg}(\theta/2) = q_1 q_2 / (2bT) \text{ (СГСЕ)},$$

$$\operatorname{tg}(\theta/2) = q_1 q_2 / (8\pi\epsilon_0 bT) \text{ (СІ)},$$

де  $q_1$  і  $q_2$  – заряди частинки і ядра,  $b$  – прицільний параметр,  $T$  – кінетична енергія налітаючої частинки.

Формула Резерфорда. Відносне число частинок, розсіяних у елементарному тілесному куті  $d\Omega$  під кутом  $\theta$  до початкового напрямку їх руху:

$$dN/N = n(q_1 q_2 / (4T))^2 d\Omega / \sin^4(\theta/2) \text{ (СГСЕ)},$$

$$dN/N = n(q_1 q_2 / (4\pi\epsilon_0 T))^2 d\Omega / \sin^4(\theta/2) \text{ (СІ)}$$

де  $n$  – число ядер фольги на одиницю її поверхні,  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ .

Умова квантування Бора-Зоммерфельда:

$$\oint p dq = nh.$$

Повна енергія електрона  $n$  – ої орбіти:

$$E_n = -R_\infty Z^2 \frac{1}{n^2},$$

де стала Рідберга  $R_\infty = \frac{m^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \eta^3}$  в системі СІ і

$$R_\infty = \frac{m^2 e^4}{2\eta^3} \text{ в системі СГСЕ.}$$

Радіус  $n$ -ої Борівської орбіти  $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \eta^2}{Zme^2} n^2$  в системі СІ і

$$r_n = \frac{\eta^2}{Zme^2} n^2 \text{ в системі СГСЕ.}$$

Стала Рідберга для атома з ядром скінченної маси:

$$R = R_\infty / (1 + m/M),$$

де  $M$  – маса ядра.

Узагальнена формула Бальмера:

$$\omega = RZ^2 (1/n_1^2 - 1/n_2^2),$$

де  $\omega$  – частота переходу (рад/с) між енергетичними рівнями з квантовими числами  $n_1$  і  $n_2$ ,  $Z$  – порядковий номер водневоподібного іона.

### Приклади розв'язування задач

**Задача 1.**  $\alpha$ -частинка з кінетичною енергією 0.27 МеВ розсіяна золотою фольгою під кутом  $60^\circ$ . Знайти відповідне значення прицільного параметра.

Прицільний параметр  $b$  і кут розсіювання  $\theta$  пов'язані співвідношенням

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{2Ze^2}{8\pi\epsilon_0 E_s b},$$

в якому енергія  $\alpha$ -частинки в системі центра інерції визначається виразом

$$E_s = \frac{M_{Au}}{M_{Au} + m_\alpha} E_0.$$

З цих двох виразів знаходимо

$$b = \frac{Ze^2 (M_{Au} + m_\alpha)}{4\pi\epsilon_0 M_{Au} E_0 \operatorname{tg} \frac{\theta}{2}}.$$

Підставивши числові значення, одержимо

$$b = \frac{79 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл})^2 (200 \text{ а.о.м.} + 4 \text{ а.о.м.})}{4 \cdot 3.14 \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Ф}}{\text{м}} \cdot 200 \text{ а.о.м.} \cdot 0.27 \cdot 1.6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж} \cdot \operatorname{tg} 30^\circ} = 0.729 \text{ нм}.$$

**Задача 2.** Знайти ймовірність того, що  $\alpha$ -частинка з енергією  $T = 3.0$  МеВ, пройшовши крізь свинцеву фольгу товщиною 1.5 мкм, розсіється в інтервалі кутів:

а)  $59^\circ - 61^\circ$ ; б)  $60^\circ - 90^\circ$ .

1). Оскільки інтервал кутів розсіювання малий, то можна вважати, що  $\theta = 60^\circ$ , а  $\Delta\theta$  записати, перетворивши інтервал  $\Delta\theta = 2^\circ$  у радіани. Тоді

$$\Delta\Omega = 2\pi \sin \theta \Delta\theta.$$

Врахувавши, що концентрація розсіюючих центрів мішені рівна

$$n = \frac{m}{\mu} N_A = \frac{N_A}{A} \rho d,$$

одержимо для імовірності розсіювання у вказаний інтервал кутів

$$\Delta\sigma = \frac{\pi}{2} \frac{N_A}{A} \rho \cdot d \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 T} \right)^2 \frac{\cos \theta \cdot \Delta\theta}{\sin^3 \frac{\theta}{2}}.$$

Підставимо числові дані. Тоді

$$\Delta\sigma = \frac{3.14 \cdot 11.3 \cdot 10^3 \frac{\text{Кг}}{\text{м}^3} \cdot 1.5 \cdot 10^{-6} \text{ м} \cdot 6.02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}}}{2 \cdot 207} \times$$

$$\times \left( \frac{82 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл})^2}{4 \cdot 3.14 \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Ф}}{\text{м}} \cdot 3 \cdot 1.6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}} \right)^2 \cdot \frac{0.866}{0.125} \cdot 0.0349 = 6 \cdot 10^{-5}.$$

2). Підставивши вираз для елемента тілесного кута

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$$

у формулу Резерфорда, одержимо

$$d\sigma = 8\pi n \left( \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 T} \right)^2 \frac{d(\sin(\theta/2))}{\sin^3 \theta/2}.$$

Проінтегрувавши цей вираз в інтервалі кутів від  $\theta_1$  до  $\theta_2$  і врахувавши вираз для концентрації розсіюючих центрів, одержимо

$$\Delta\sigma = \pi \frac{N_A}{A} \rho d \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 T} \right)^2 \left( \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta_1}{2}} - \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta_2}{2}} \right).$$

Нарешті, підставляючи числові дані, знаходимо

$$\Delta\sigma = \frac{3.14 \cdot 11.3 \cdot 10^3 \frac{\text{Кг}}{\text{м}^3} \cdot 1.5 \cdot 10^{-6} \text{ м} \cdot 6.02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}}}{207}.$$

$$\left( \frac{82 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл})^2}{4 \cdot 3.14 \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Ф}}{\text{м}} \cdot 3 \cdot 1.6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}} \right)^2 \cdot \left( \frac{1}{\sin^2 30^\circ} - \frac{1}{\sin^2 45^\circ} \right) = 5 \cdot 10^{-4}.$$

**Задача 3.** Двом лініям серії Бальмера атома водню відповідають довжини хвиль  $\lambda_1 = 656.2 \text{ нм}$  і  $\lambda_2 = 434.0 \text{ нм}$ . Спираючись на комбінаційний принцип Рітца, визначити, якій серії належить спектральна лінія, хвильове число якої рівне різниці хвильових чисел цих двох ліній.

Записавши формулу Бальмера для обох ліній серії Бальмера

$$\frac{1}{\lambda_1} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right),$$

$$\frac{1}{\lambda_2} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

і використавши значення постійної Рідберга і довжин хвиль обидвох ліній, знайдемо

$$\frac{1}{n_1^2} = \frac{1}{2^2} - \frac{1}{R\lambda_1} = 0.25 - \frac{1}{1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} \cdot 6.562 \cdot 10^{-7} \text{ м}} = 0.111,$$

$$\frac{1}{n_2^2} = \frac{1}{2^2} - \frac{1}{R\lambda_2} = 0.25 - \frac{1}{1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} \cdot 4.34 \cdot 10^{-7} \text{ м}} = 0.04.$$

Звідси  $n_1 = 3$ , а  $n_2 = 5$ .

Застосувавши комбінаційний принцип Рітца, знайдемо

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

Підставивши значення сталої Рідберга та  $n_1$  і  $n_2$ , знайдемо

$$\lambda = \left( 1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{5^2} \right) \right)^{-1} = 128.2 \text{ нм}.$$

**Задача 4.** Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда, знайти дозволених значення енергії частинки з масою  $m$ , що рухається

а) в одновимірній прямокутній потенціальній ямі шириною  $l$  та нескінченно високими стінками;

б) по колу радіусом  $r$ ;

в) в одновимірному потенціальному полі  $U = \alpha x^2/2$ , де  $\alpha$  – додатня стала;

г) по коловій орбіті у центральному полі, де потенціальна енергія  $U = -\alpha/r$ , причому  $\alpha$  – додатня стала.

1). В одновимірній потенціальній ямі  $U = 0$  і  $p = 0$ , так що умова Бора-Зоммерфельда набуває вигляду:

$$\int_0^l p dx = 2\pi\eta n,$$

що веде до співвідношення

$$2 pl = 2\pi\eta n$$

або

$$p = \frac{\pi\eta n}{l}.$$

Енергія ж частинки рівна

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \eta^2 n^2}{2ml^2}.$$

2). У цьому випадку  $U = 0$  і  $p = 0$ . Тому одержимо:

$$\int_0^{2\pi} p dr = 2\pi\eta n,$$

що дає

$$2\pi r p = 2\pi \eta n ,$$

а

$$p = \frac{2\pi \eta n}{2\pi r} = \frac{\eta n}{r} .$$

Енергія частинки має значення:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\eta^2 n^2}{2mr^2} .$$

3). У випадку одновимірного потенціального поля  $U = \alpha x^2/2$  де ( $\alpha > 0$ ) закон руху має вигляд  $x = x_0 \sin \omega t$ , а імпульс  $p = mx_0 \omega \cos \omega t$ .

Умову Бора-Зоммерфельда для цього випадку можна записати

$$\oint p dx = \int_0^T p \frac{dx}{dt} dt = \int_0^T \frac{p^2}{m} dt = \frac{1}{2} m x_0^2 \omega^2 T = 2\pi \eta n .$$

Враховавши зв'язок періоду з частотою руху

$$T = \frac{2\pi}{\omega} ,$$

одержимо

$$\frac{2\pi}{2} \frac{m x_0^2 \omega}{2} = 2\pi \eta n ,$$

звідки

$$\frac{x_0^2}{2} = \frac{\eta n}{m \omega} .$$

Тоді енергія частинки

$$E_n = \frac{\alpha x_0^2}{2} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \eta n .$$

4). При русі в центральносиметричному полі з потенціалом  $U = -\alpha/r$  ( $\alpha > 0$ ) рівняння руху має вигляд

$$\frac{mv^2}{r} = -\frac{\alpha}{r^2} ,$$

а закон збереження енергії

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{\alpha}{r} = -\frac{\alpha}{2r} .$$

Умова Бора-Зоммерфельда дає

$$\oint p dr = \int_0^{2\pi} m v r d\varphi = 2\pi m v r = 2\pi \eta n ,$$

звідки

$$mvr = \eta n .$$

Врахувавши в останній рівності рівняння руху, знайдемо

$$v = \frac{\alpha}{\eta n} .$$

Тоді енергія

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\eta^2 n^2} .$$

### Задачі для самостійного розв'язання

**1.1.** Виходячи з моделі атома Томсона, визначити:

- а) радіус атома водню, енергія іонізації якого  $E_i = 13.6$  еВ;
- б) частоту коливання електрона  $\omega$ , якщо радіус атома водню  $r$ . При якому значенні  $r$  довжина хвилі випромінювання світла  $\lambda = 0.6$  мкм?

**1.2.** На яку найменшу відстань наближається  $\alpha$ -частинка з кінетичною енергією  $T = 40$  кеВ (при лобовому зіткненні):

- а) до ядра свинцю, що перебуває у стані спокою;
- б) до ядра  ${}^7\text{Li}$ , що спочатку перебувало у стані спокою?

**1.3.** Показати, що за класичною механікою при зіткненні  $\alpha$ -частинки з ядром, заряд якого  $Ze$ , прицільна відстань  $b$  пов'язана з кутом відхилення  $\theta$  формулою  $\text{ctg} \frac{\theta}{2} = \frac{2\pi\epsilon_0 m b v^2}{Ze^2}$ , де  $m$  – маса  $\alpha$ -частинки,  $v$  – її швидкість.

**1.4.**  $\alpha$ -частинка з імпульсом  $53$  МеВ/с ( $c$ -швидкість світла) розсіялась під кутом  $60^\circ$  в кулонівському полі нерухомого ядра атома урану. Знайти прицільний параметр  $b$ .

**1.5.** Нерелятивістська частинка масою  $m_1$  і з кінетичною енергією  $T$  зазнала лобового зіткнення з частинкою масою  $m_2$ , що перебувала в стані спокою. Знайти кінетичну енергію частинки після зіткнення.

**1.6.** Протон з кінетичною енергією  $T = 10$  МеВ пролітає на відстані  $b = 10$  пм від нерухомого електрона. Знайти енергію, яку одержить електрон, враховуючи, що траєкторія протона прямолінійна і за час проходження електрон залишається практично нерухомим.

**1.7.**  $\alpha$  - частинка з кінетичною енергією  $T$  налітає з прицільним параметром  $b = 0.90 \cdot 10^{-13}$  м на ядро свинцю, що перебуває у стані спокою. Знайти:

- а) модуль приросту вектора імпульсу розсіяної  $\alpha$ -частинки, якщо  $T = 2.3$  МеВ;

б) при якому значенні  $T$  модуль приросту вектора імпульсу буде максимальним для даного прицільного параметра? Який кут розсіювання при цьому?

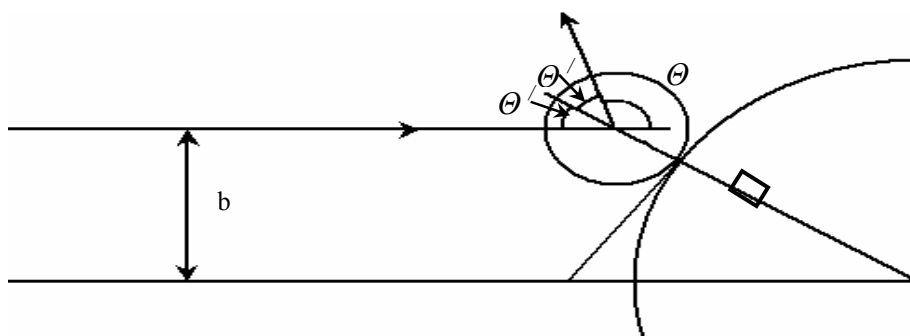
**1.8.**  $\alpha$ -частинка з енергією  $E_0 = 6$  MeV (в лабораторній системі відліку) рухається по прямій, що проходить через неї та ядро атома свинцю  $^{207}\text{Pb}$  (лобове зіткнення). Знайти найменшу відстань, на яку наблизились частинки.

**1.9.**  $\alpha$ -частинка з кінетичною енергією 0.27 MeV розсіяна золотою фольгою під кутом  $60^\circ$ . Знайти відповідне значення прицільного параметра.

**1.10.**  $\alpha$ -частинка проходить через плівку вуглецю  $^{12}\text{C}$  і відхиляється від попереднього напрямку на кут  $30^\circ$  (в системі центра інерції). Енергія  $\alpha$ -частинки в лабораторній системі відліку  $E_0 = 5$  MeV. Атом вуглецю до зіткнення вважати нерухомим відносно лабораторної системи відліку. Знайти прицільну відстань при цьому зіткненні і порівняти її з ефективним радіусом ядра вуглецю, що відповідає прицільній відстані, рівній нулю.

**1.11.** Нерухому кулю радіуса  $R$  опромінюють паралельним потоком частинок, радіус яких  $r$ . Вважаючи зіткнення частинок з кулею пружними, знайти:

- кут  $\theta$  відхилення частинки як функцію її прицільного параметра  $b$ ;
- відносну кількість частинок, які після зіткнення з кулею розсіялись в інтервалі кутів від  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ ;
- ймовірність того, що частинка після зіткнення з кулею розсіється в передню півсферу ( $\theta < \pi/2$ ).



**1.12.** Одержати з формули  $\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 T b}$  вираз для відносної

кількості частинок, що розсіялися в інтервалі кутів  $\theta \div \theta + d\theta$ , і відповідний ефективний переріз ядра.

**1.13.** Диференціальний переріз розсіювання  $\alpha$ -частинок кулонівським полем нерухомого ядра  $d\sigma/d\Omega = 7.0 \cdot 10^{-25} \text{ м}^2 \text{ ср}^{-1}$  для кута

$\theta_0 = 30^\circ$ . Обчислити переріз розсіювання  $\alpha$ -частинок в інтервалі кутів  $\theta > \theta_0$ .

**1.14.** Знайти ймовірність того, що  $\alpha$ -частинка з енергією  $T = 3.0$  MeV, пройшовши крізь свинцеву фольгу товщиною 1.5 мкм, розсіється в інтервалі кутів:

а)  $59^\circ - 61^\circ$ ; б)  $60^\circ - 90^\circ$ .

**1.15.** Вузький пучок  $\alpha$ -частинок з кінетичною енергією 1.0 MeV падає нормально на платинову фольгу товщиною 1.0 мкм. Спостереження розсіяних частинок ведеться під кутом  $60^\circ$  до напрямку падаючого пучка за допомогою лічильника з круглим вхідним отвором площею  $1.0 \text{ см}^2$ , який розташований на відстані 10 см від ділянки фольги, що розсіює. Яка частина розсіяних  $\alpha$ -частинок попаде в отвір лічильника?

**1.16.** На плівку-мішень товщиною  $d_0 = 2$  мкм з алюмінію нормально до її площини падає пучок  $\alpha$ -частинок з енергією  $E_0 = 4$  MeV (у лабораторній системі відліку) інтенсивністю  $I = 10^9 \text{ с}^{-1} \text{ м}^{-2}$ . Визначити скільки частинок розсіюється в інтервалі кутів  $\theta_s = 49^\circ \div 51^\circ$  (у системі центра інерції) за 20 хв. Скільки  $\alpha$ -частинок розсіється за тих же умов, якщо алюмінієву мішень замінити мішенню із золота тієї ж товщини?

**1.17.** Вузький пучок  $\alpha$ -частинок падає нормально на срібну фольгу. За нею встановлений лічильник, який реєструє частинки, розсіяні відповідно до формули Резерфорда. При заміні срібної фольги на платинову тієї ж масової товщини кількість  $\alpha$ -частинок, що реєструються за одиницю часу, зросла в  $\eta = 1.52$  рази. Знайти порядковий номер платини  $Z$ , вважаючи, що порядковий номер срібла і масові числа обох елементів відомі.

**1.18.** Вузький пучок  $\alpha$ -частинок з кінетичною енергією  $T = 0.50$  MeV падає нормально на золоту фольгу, масова товщина якої  $\rho d = 1.5 \text{ мг см}^{-2}$ . Інтенсивність пучка  $I_0 = 5.0 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$ . Знайти кількість  $\alpha$ -частинок, розсіяних фольгою за  $\tau = 30$  хв, в інтервалах кутів:

а)  $59^\circ - 61^\circ$ , б) більше  $\theta_0 = 60^\circ$ .

**1.19.** За класичною електродинамікою електрон, що рухається з прискоренням  $w$ , втрачає енергію на випромінювання за законом:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2e}{3c^2} w^2,$$

де  $e$  – заряд електрона,  $c$  – швидкість світла. Оцінити час, за який енергія електрона, що здійснює коливання, близькі до гармонічних з частотою  $\omega = 5 \cdot 10^{15} \text{ рад с}^{-1}$ , зменшиться в  $\eta = 10$  раз.

**1.20.** Скориставшись формулою з попередньої задачі, оцініть час, за який електрон, що рухається в атомі водню по коловій орбіті



радіуса  $r = 50\text{пм}$ , впав би на ядро. Для спрощення вважати, що вектор  $w$  весь час направлений до центра атома.

**1.21.** Показати, що частота світла, яке випромінюється при переході електрона з  $(n+1)$ -ої орбіти на  $n$ -ну орбіту при  $n \rightarrow \infty$ , наближається до частоти обертання електрона навколо ядра.

**1.22.** Показати, що частота  $\omega$  фотона, що виникає при переході електрона між сусідніми коловими орбітами водневоподібного іона, задовольняє нерівність  $\omega_{n+1} < \omega < \omega_n$ , де  $\omega_n$  і  $\omega_{n+1}$  - частоти обертання електрона навколо ядра на цих колових орбітах. Переконатися, що при  $n \rightarrow \infty$  частота фотона  $\omega \rightarrow \omega_n$ .

**1.23.** Частинка масою  $m$  рухається по коловій орбіті в центрально-симетричному потенціальному полі  $U(r) = k r^2/2$ . За допомогою борівської умови квантування знайти співвідношення для можливих радіусів орбіт і рівнів енергії цієї частинки.

**1.24.** Атом водню, що перебуває у збудженому стані, може, повертаючись в основний стан, випромінити 6 ліній. Знайти номер збудженого стану і довжину випромінюваних хвиль.

**1.25.** Скільки спектральних ліній буде випромінювати атомарний водень, збуджений на  $n$ - й енергетичний рівень?

**1.26.** Двом лініям серії Бальмера атома водню відповідають довжини хвиль  $\lambda_1 = 656.2\text{ нм}$  і  $\lambda_2 = 434.0\text{ нм}$ . Спираючись на комбінаційний принцип Рітца, визначити, якій серії належить спектральна лінія, хвильове число якої рівне різниці хвильових чисел цих двох ліній.

**1.27.** Якій серії належить спектральна лінія атомарного водню, хвильове число якої дорівнює різниці хвильових чисел таких ліній серії Бальмера:  $486.1$  і  $410.2\text{ нм}$ ? Знайти довжину хвилі цієї лінії.

**1.28.** Якому елементу належить водневоподібний спектр, довжини хвиль ліній якого в чотири рази коротші, ніж у атома водню?

**1.29.** Знайти сталу Рідберга  $R$ , якщо відомо, що для іонів  $\text{He}^+$  різниця довжин хвиль між головними лініями серії Бальмера і Лаймана  $\Delta\lambda = 133.7\text{ нм}$ .

**1.30.** Знайти довжину хвилі головної лінії цієї спектральної серії іонів  $\text{He}^+$ , у якої інтервал між крайніми лініями  $\Delta\omega = 5.18 \cdot 10^{15}\text{ рад с}^{-1}$ .

**1.31.** Знайти енергію зв'язку електрона в основному стані водневоподібних іонів, у спектрі яких довжина хвилі третьої лінії Бальмера рівна  $108.5\text{ нм}$ .

**1.32** Знайти швидкість фотоелектронів, які вириваються під впливом електромагнітного випромінювання довжиною хвилі  $\lambda = 18.0\text{ нм}$  з нерухомих іонів  $\text{He}^+$ , що знаходяться в основному стані.

**1.33.** З якою мінімальною кінетичною енергією повинен рухатися атом водню, щоб при непружному лобовому зіткненні з іншим, який перебуває у стані спокою, один з них зміг би випромінювати фотон? Вважати, що до зіткнення атоми перебували в основному стані.

**1.34.** Нерухомий атом водню випромінює фотон, що відповідає головній лінії серії Лаймана. Якої швидкості набув атом?

**1.35.** Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда, знайти дозвалені значення енергії частинки з масою  $m$ , що рухається:

а) в одновимірній прямокутній потенціальній ямі шириною  $l$  та нескінченно високими стінками;

б) по колу радіусом  $r$ ;

в) в одновимірному потенціальному полі  $U = \alpha x^2/2$ , де  $\alpha$  – додатня стала;

г) по коловій орбіті у центральному полі, де потенціальна енергія  $U = -\alpha/r$ , причому  $\alpha$  – додатня стала.

**1.36.** У спектрі випромінювання водню поблизу лінії з довжиною хвилі  $\lambda_1 = 486.1320$  нм виявлено лінію з  $\lambda_2 = 485.9975$  нм. Є підстави припускати, що ця лінія належить спектру випромінювання ізотопу водню. Визначити ізотоп.

**1.37.** Визначити різницю довжин хвиль ліній  $H_\alpha$  і  $D_\alpha$  (першої лінії серії Бальмера дейтерію). Визначити також різницю довжин хвиль ліній  $H_\gamma$  і  $D_\gamma$ .

**1.38.** У газорозрядній трубці, наповненій сумішшю водню і гелію, Фаулер спостерігав серію

$$1/\lambda = R'(1/1.5^2 - 1/n^2), n = 2, 3, 4, \dots, (1),$$

а Піккерінг у спектрі планетарної туманності ( $\xi$  Корми) відкрив серію

$$1/\lambda = R'(1/2^2 - 1/(n + 1/2)^2), n = 2, 3, 4, \dots, (2).$$

До теорії Бора серії Фаулера і Піккерінга приписувалися атомарному водню. Бор пояснив походження обох серій, вважаючи, що вони належать не водню, а однократно іонізованим атомам гелію. Це пояснення було підтверджено дослідом, який показав, що обидві серії спостерігаються у чистому гелії, але їх ніколи не буває у випадку чистого водню. Які спектральні лінії однократно іонізованого гелію ототожнювались із серіями (1) і (2)? Чим відрізняються спектральні серії іонізованого гелію від відповідних серій атомарного водню?

**1.39.** Позитроній є зв'язаною системою електрона і позитрона, що обертаються навколо їх центра мас. Знайти енергетичні рівні, енергію іонізації і довжину хвилі резонансної лінії позитронію.

**1.40.** Негативні мюони можуть захоплюватися атомом і заміщати у ньому електрони електронної оболонки. Практично може заміщатися лише один електрон. Системи, що виникають внаслідок такої заміни, називають мезоатомами. Маса мюона  $m_\mu = 207 m_e$ . Обчислити за теорією Бора радіус першої колової орбіти мюона в мезоатомі. Розрахувати енергетичні рівні мезоатома. Яке випромінювання спостерігатиметься при переході на цю орбіту мюона з більш високих орбіт? Чому дослідження такого випромінювання використовують для вивчення структури важких ядер біля їх поверхні?

**1.41.** Притягання між електроном і діркою у напівпровіднику іноді можна описати законом Кулона, що діє у середовищі з діелектричною проникністю  $\epsilon$ . Знайти за таких умов рівні енергії  $E_n$  і радіуси  $r_n$  екситона – водневоподібної системи, яка складається із електрона і дірки – при різних значеннях квантових чисел  $n$ . Якою є енергія зв'язку і характерний радіус  $a_I$  такого екситона при  $\epsilon = 10$  та ефективній масі електрона і дірки  $m_e^* = m_h = m_e / 10$ ?

**1.42.** Перехід між якими орбітами іона гелію  $\text{He}^+$  супроводжується випромінюванням з довжиною хвилі, близькою до  $\text{H}_\alpha$ ?

**1.43.** Якою є різниця між довжинами хвиль лінії  $\text{H}_\alpha$  і відповідної лінії спектра  $\text{He}^+$ ?

**1.44.** Сталі Рідберга для водню і гелію рівні відповідно  $R_H = 109677.6 \text{ см}^{-1}$ ,  $R_{\text{He}} = 109722.3 \text{ см}^{-1}$ . Знайти відношення  $m_H/m_e$  і  $m_{\text{He}}/m_H$ . ( $R_{\text{He}} = 109737.309 \text{ см}^{-1}$ ).

**1.45.** Питомий заряд електрона  $e/m$  можна обчислити із спектроскопічних даних. Виконати це обчислення, користуючись спектроскопічними даними  $R_H = 109677.57 \text{ см}^{-1}$ ,  $R_D = 109707.419 \text{ см}^{-1}$ , молярними масами атомарних водню та дейтерію  $\mu_H = 1.008142 \text{ г/моль}$ ,  $\mu_D = 2.014757 \text{ г/моль}$  і сталою Фарадея  $F = N_a e = 9.65 \cdot 10^4 \text{ Кл моль}^{-1}$ .

## II. ХВИЛЬОВІ ВЛАСТИВОСТІ ЧАСТИНОК

### Найважливіші поняття, закони і формули

Співвідношення де Бройля, що пов'язують між собою корпускулярні характеристики (енергія  $E$ , імпульс  $p$ ) із хвильовими характеристиками (частотою  $\omega$ , хвильовим вектором  $k$ ), мають відповідно вигляд:

$$E = \hbar \omega,$$

$$\lambda = h/p,$$

де  $\lambda$  – дебройлівська довжина хвилі частинки з імпульсом  $p$ :

Групова швидкість хвиль де Бройля:

$$v_{gp} = \partial \omega / \partial k,$$

фазова швидкість

$$v_{\phi} = \omega/k = E/p.$$

Співвідношення невизначеностей Гейзенберга:  
для координати і відповідної проекції імпульса:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar,$$

для енергії і часу:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar.$$

### Приклади розв'язування задач

**Задача 1.** Знайти дебройлівську довжину хвилі релятивістських електронів, які підлітають до анода рентгенівської трубки, якщо довжина хвилі короткохвильової межі неперервного рентгенівського спектра  $\lambda_k = 10.0$  нм?

Для релятивістської частинки можна записати такі співвідношення

$$p^2 c^2 + m_0^2 c^4 = E^2,$$

$$T = E - m_0 c^2.$$

Короткохвильовій межі суцільного рентгенівського спектру відповідає максимальна енергія, яка рівна кінетичній енергії електрона, отже

$$T = \frac{hc}{\lambda_k}.$$

За означенням, дебройлівська довжина хвилі частинки

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

Із наведених співвідношень знаходимо

$$\lambda = \frac{\lambda_k}{\left(1 + \frac{m \lambda_k}{\pi \hbar c}\right)^{1/2}}.$$

Підставляючи числові значення, одержимо

$$\lambda = \frac{10^{-10} \text{ м}}{\left[ 1 + \frac{0.511 \cdot 10^6 \text{ eВ} \cdot 10^{-10} \text{ м}}{3.14 \cdot 6.6 \cdot 10^{-16} \text{ eВ} \cdot c \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{\text{м}}{\text{с}}} \right]^{\frac{1}{2}}} = 3.3 \text{ нм}.$$

**Задача 2.** Швидкість макроскопічного тіла вимірюють за доплерівською зміною частоти світлової хвилі при відбиванні від цього тіла. Проаналізувати цей спосіб і показати, що відповідні неточності імпульсу і положення тіла задовольняють співвідношення невизначеностей Гейзенберга.

Нехай тіло є дзеркалом, яке ідеально відбиває світло, що нормально падає на його поверхню. На основі законів збереження енергії та імпульсу

$$\eta\omega_0 + \frac{mv_0^2}{2} = \eta\omega + \frac{mv^2}{2},$$

$$\frac{\eta\omega_0}{c} + mv_0 = -\frac{\eta\omega}{c} + mv,$$

де  $m$  – маса тіла,  $v_0$  і  $v$  – його швидкість до і після відбивання,  $\omega_0$  і  $\omega$  – частоти падаючого і відбитого фотонів. Переписавши ці рівняння у вигляді

$$m(v^2 - v_0^2) = 2\eta(\omega - \omega_0),$$

$$m(v - v_0) = \frac{\eta(\omega + \omega_0)}{c},$$

почленно поділивши, знаходимо

$$v + v_0 = 2c \frac{\omega - \omega_0}{\omega + \omega_0}$$

Масу дзеркала можна вважати нескінченно великою порівняно з масою фотона. Тоді

$$v = v_0 = c \frac{\omega - \omega_0}{\omega + \omega_0}$$

Вимірявши частоти  $\omega_0$  і  $\omega$ , можна за цією формулою обчислити швидкість дзеркала. Частоту  $\omega_0$  можна вважати виміряною точно. Тоді похибка у значенні швидкості  $\Delta v$  буде визначатися неточністю вимірювання частоти  $\omega$ . Щоб виміряти  $\omega$  з точністю  $\Delta\omega$ , тривалість вимірювання  $\Delta t$  повинна задовольняти умову  $\Delta\omega \cdot \Delta t \sim 2\pi$ . Похибку швидкості знайдемо із співвідношення

$$\Delta v = -\frac{2c\omega_0 \cdot \Delta\omega}{(\omega + \omega_0)^2} \approx -c \frac{\Delta\omega}{2\omega_0}.$$

Оскільки моменти часу відбивання фотонів відомі з похибкою  $\Delta t$ , то неточність у значенні швидкості  $v$  призведе до похибки  $\Delta x$  при визначенні координати дзеркала:

$$\Delta x \sim |\Delta v \Delta t| \sim c \frac{|\Delta v \Delta t|}{2\omega_0} \sim \frac{\pi c}{\omega_0}.$$

При взаємодії з фотоном дзеркало одержить неконтрольовану зміну імпульсу

$$\Delta p \sim \frac{2\omega_0 h}{c}.$$

Відповідно

$$\Delta p \Delta x \sim h.$$

### Задачі для самостійного розв'язання

**2.1.** Знайти довжину хвилі де Бройля для електрона з енергією  $T = 1 \text{ MeV}$ .

**2.2.** Одержати вираз для дебройлівської довжини хвилі релятивістської частинки, яка рухається з кінетичною енергією  $T$ . При яких значеннях  $T$  похибка у визначенні  $\lambda$  за нерелятивістською формулою не перевищує 1% для електрона і протона?

**2.3.** При якому значенні кінетичної енергії дебройлівська довжина хвилі електрона рівна його комптонівській довжині хвилі?

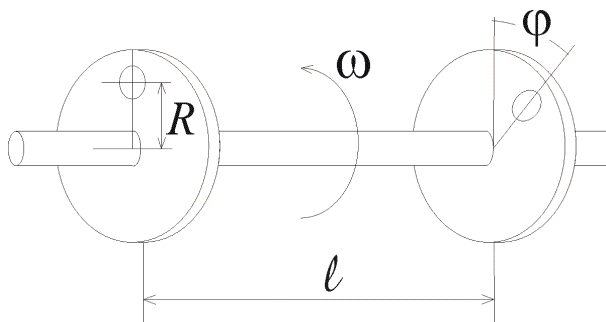
**2.4.** Знайти дебройлівську довжину хвилі релятивістських електронів, які підлітають до анода рентгенівської трубки, якщо довжина хвилі короткохвильової межі неперервного рентгенівського спектра  $\lambda_k = 10.0 \text{ пм}$ ?

**2.5.** Знайти наближений вираз для довжини хвилі де Бройля ультрарелятивістської частинки, тобто частинки, кінетична енергія якої  $T$  значно перевищує енергію спокою  $mc^2$ . Знайти  $\lambda$  для ультрарелятивістської частинки з  $T = 10 \text{ GeV}$ .

**2.6.** Нейтрон з кінетичною енергією  $T = 25 \text{ eV}$  налітає на нерухомий дейтон (ядро важкого водню). Знайти дебройлівські довжини хвиль двох частинок у системі їх центра інерції.

**2.7.** Визначити дебройлівську довжину хвилі електрона, що обертається по  $n$ -ій борівській орбіті навколо ядра із зарядом  $Ze$ .

**2.8.** В одному з способів монохроматизації повільних нейтронів використовують два кадмієві диски, що насаджені на спільну вісь



На периферії диска на однакових відстанях  $R$  від осі зроблено два круглих отвори діаметром  $d$ . Отвори повернуті один відносно одного на кут  $\varphi$  навколо осі приладу і в цьому положенні закріплені. Диски рівномірно обертаються навколо тієї ж осі з кутовою швидкістю  $\omega$ . Визначити довжину хвилі де Бройля  $\lambda$ , а також ступінь

монохроматичності нейтронів, які проходять через такий монохроматор, якщо відстань між дисками  $l$ . Виконати чисельний розрахунок для  $l = 1$  м,  $R = 10$  см,  $\omega = 300$  с<sup>-1</sup>,  $\phi = 4^\circ$ ,  $d = 5$  мм.

**2.9.** Вузький пучок моноенергетичних електронів падає під кутом ковзання  $\theta = 30^\circ$  на природню грань монокристала алюмінію. Відстань між сусідніми кристалічними площинами, паралельними цій грані монокристала,  $d = 0.20$  нм. При деякій прискорюючій напрузі  $U_0$  спостерігали максимум дзеркального відбивання. Знайти  $U_0$ , якщо відомо, що наступний максимум дзеркального відбивання виявився при збільшенні прискорюючої напруги в  $\eta = 2.25$  разів.

**2.10.** Вузький пучок моноенергетичних електронів падає нормально на поверхню монокристала нікелю. У напрямку, що становить кут  $\theta = 55^\circ$  з нормаллю до площини поверхні спостерігається максимум відбивання четвертого порядку при енергії електронів  $T = 180$  еВ. Розрахувати відповідні значення міжплощинної відстані.

**2.11.** У релятивістській і нерелятивістській теоріях зв'язок між хвильовими і корпускулярними властивостями частинки, що вільно рухається, виражається однаковими за виглядом формулами  $E = \eta \omega$  і  $p = \eta k$ . Проте в релятивістській теорії під  $E$  розуміють повну, а в нерелятивістській лише кінетичну ( $p^2/2m$ ) енергію частинки. Чому ці два вирази (там де можна застосувати нерелятивістське наближення) не призводять до суперечності?

**2.12.** Швидкість макроскопічного тіла вимірюють за доплерівською зміною частоти світлової хвилі при відбиванні від цього тіла. Проаналізувати цей спосіб і показати, що відповідні неточності імпульсу і координати тіла задовольняють співвідношення невизначеностей Гейзенберга.

**2.13.** Знайти за порядком величини радіус атома водню в основному стані і енергію зв'язку електрона в цьому ж стані, використовуючи співвідношення невизначеностей Гейзенберга. Оцінити в такий же спосіб розмір двоатомної молекули і енергію її основного стану, приблизно розглядаючи молекулу як одновимірний осцилятор з власною частотою  $\omega_0$  і зведеною масою  $\mu$ .

**2.14.** Оцінити найбільшу енергію зв'язку електрона, локалізованого в ділянці простору, радіус якої  $r \sim 10^{-10}$  м (атом) і  $r \sim 10^{-10}$  м (атомне ядро). Які висновки можна зробити з одержаного значення енергії, якщо врахувати, що енергія зв'язку ядерної частинки не переважає 10 МеВ?

*Вказівки:* Використати співвідношення невизначеностей Гейзенберга у формі точної нерівності  $\overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta p_x^2} \geq \eta^2/4$ .

**2.15.** Паралельний пучок атомів водню зі швидкістю  $v = 600$  м/с падає нормально на діафрагму з вузькою щілиною, за якою на відстані  $l = 1.0$  м знаходиться екран. Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей ширину  $\delta$  щілини, при якій ширина її зображення на екрані буде мінімальною.

**2.16.** Середній час життя атома у збудженому стані становить близько  $\Delta t \sim 10^{-8}$  с. При переході атома у нормальний стан випромінюється фотон, середня довжина хвилі якого рівна  $\lambda$ . Оцінити ширину  $\Delta\lambda$  і відносну ширину  $\Delta\lambda/\lambda$  спектральної лінії випромінювання, якщо відсутнє її розширення внаслідок інших процесів. (Така ширина називається природною шириною спектральної лінії).

**2.17.** Холодну емісію електронів з металу пробували пояснити класично впливом сили електричного відображення  $e^2/(4\pi\epsilon_0(4x^2))$ , з якою електрон притягається до поверхні металу. Врахування цієї сили призводить до того, що потенціальна енергія електрона поблизу поверхні металу набуває вигляду  $U = C - eEx - e^2/(4\pi\epsilon_0(4x^2))$ . Ця сила знижує потенціальний бар'єр, що його повинен подолати електрон, щоб вийти з металу, тобто зменшує роботу виходу. Розрахувати це зменшення і оцінити напруженість зовнішнього поля, починаючи з якої повинна б відбуватися холодна емісія для вольфраму, робота виходу з якого  $A = 4.5$  еВ.

**2.18.** Частинка масою  $m$  знаходиться в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками. Ширина ями рівна  $l$ . Знайти можливі значення енергії частинки, враховуючи, що реалізуються лише такі стани її руху, для яких у ямі вкладається ціле число півхвиль де Бройля.

**2.19.** Вільний електрон спочатку був локалізований в об'ємі розміром  $l = 0.10$  нм. Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей для часу і енергії, за який час ширина відповідного хвильового пакету збільшиться в  $\eta = 10$  разів.



### III. ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Найважливіші поняття, закони і формули

*Часовозалежне і стаціонарне рівняння Шредінгера:*

$$i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hbar^2 / (2m) \nabla^2 \Psi + U \Psi,$$

$$\nabla^2 \psi + 2m / \hbar^2 (E - U) \psi = 0,$$

де  $\Psi$  – повна хвильова функція,  $\psi$  – її координатна частина,  $\nabla^2 = \Delta$  – оператор Лапласа,  $E$  і  $U$  – повна і потенціальна енергії частинки.

*У сферичних координатах:*

$$\nabla^2 = \partial^2 / \partial r^2 + 2/r \partial / \partial r + 1/(r^2 \sin \vartheta) \partial / \partial \vartheta (\sin \vartheta \partial / \partial \vartheta) + 1/r^2 \sin^2 \vartheta \partial^2 / \partial \varphi^2.$$

*Коефіцієнт прозорості потенціального бар'єру  $U(x)$ :*

$$D \approx \exp \left[ -2/\hbar \int_{x_1}^{x_2} (2m(U-E))^{1/2} dx \right],$$

де  $x_1$  і  $x_2$  – координати точок, між якими  $U > E$ .

*Оператор  $\hat{L}$  є лінійним, якщо*

$$\hat{L}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \hat{L} \psi_1 + c_2 \hat{L} \psi_2,$$

де  $c_1$  і  $c_2$  – довільні сталі,  $\psi_1$  і  $\psi_2$  – довільні функції.

*Оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  комутативні, якщо їх комутатор*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} = 0$$

*Оператор  $\hat{L}$  ермітовий (самоспряжений), якщо*

$$\int \psi_1^* \hat{L} \psi_2 dx = \int \psi_2^* \hat{L}^* \psi_1 dx.$$

*Середнє значення механічної величини  $L$  у стані  $\psi$ :*

$$\langle L \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi d\tau,$$

де  $\hat{L}$  – відповідний оператор,  $\psi$  – нормована хвильова функція,  $d\tau$  – елемент об'єму.

*Основні квантовомеханічні оператори:*

$$\text{проекції імпульсу} \quad \hat{p}_x = -i\hbar \partial / \partial x,$$

$$\text{імпульсу} \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla,$$

$$\text{проекцій моменту імпульсу} \quad \hat{L}_x = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = z \hat{p}_x - x \hat{p}_z,$$

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = i\hbar \partial/\partial\varphi,$$

$$\text{енергії} \quad \hat{H} = -\hat{p}^2/2m + U = -\hbar^2/(2m)\Delta + U.$$

## Приклади розв'язування задач

**Задача 1.** Частинка масою  $m$  знаходиться в одновимірному потенціальному полі  $U(x)$ , вигляд якого показаний на рис. 1, де  $U(0) = \infty$ . Знайти:

1) рівняння, що визначає можливі значення енергії частинки при  $E < U_0$ ; привести це рівняння до вигляду  $\sin kl = \pm kl(\hbar^2/(2ml^2U_0))^{1/2}$ , де  $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ . Показати за допомогою графічного розв'язку цього рівняння, що можливі значення енергії частинки утворюють дискретний спектр;

2) мінімальне значення величини  $l^2U_0$ , при якому виникає перший енергетичний рівень при  $E < U_0$ , а також, при якому мінімальному значенні  $l^2U_0$

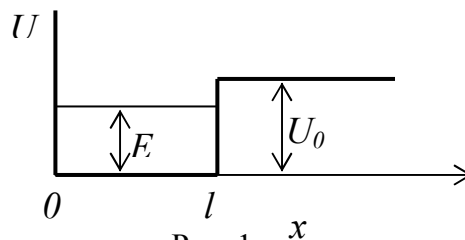


Рис. 1

виникне  $n$ -й рівень?

1). Запишемо рівняння Шредінгера для двох областей:

$$\psi_1'' + \kappa^2 \psi_1 = 0, \quad \text{для } 0 < x < l,$$

$$\text{де } \kappa^2 = 2mE/\hbar^2,$$

$$\psi_2'' + \kappa^2 \psi_2 = 0, \quad \text{для } x > l,$$

$$\text{де } \kappa^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2.$$

Їх загальні розв'язки

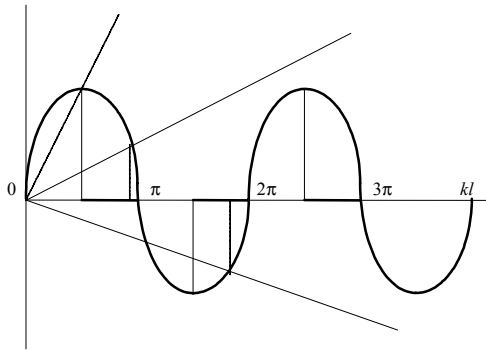
$$\psi_1(x) = a \sin(\kappa x + \alpha),$$

$$\psi_2(x) = b \exp(-\kappa x) + c \exp(\kappa x)$$

повинні задовольняти стандартні граничні умови. З умови  $\psi_1(x) = 0$  і вимоги скінченості хвильової функції випливає, що  $\alpha = 0$  і  $c = 0$ . З неперервності  $\psi(x)$  і її похідної в точці  $x = l$  одержимо  $\tan kl = -\kappa/\kappa$  або

$$\sin kl = \pm kl \frac{\hbar}{\sqrt{2ml^2U_0}}$$

Зобразивши графічно ліву і праву частини цього рівняння, знайдемо точки перетину прямої з синусоїдою. При цьому корені рівняння, що відповідають власним значенням енергії  $E$ , будуть відповідати тим точкам перетину  $(kl)_i$ , для яких  $\tan(kl)_i < 0$ , тобто корені цього рівняння будуть знаходитися у парних чвертях кола (ці ділянки осі абсцис виділені на рис. 2 жирними відрізками). З графіка видно, що корені рівняння, тобто зв'язані стани



частинки, існують не завжди. Пунктиром показано граничне значення положення прямої.

$$2). (l^2 U_0)_{1 \text{ мін}} = \pi^2 \hbar^2 / (8m), \\ (l^2 U_0)_{n \text{ мін}} = (2n - 1) \pi^2 \hbar^2 / (8m).$$

Рис. 2.

**Задача 2.** Довести такі теореми:

а) якщо оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  мають спільні власні функції, то такі оператори комутують;

б) якщо оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  комутують, то вони мають спільні власні функції (довести для випадку відсутності виродження).

в) якщо оператор  $\hat{A}$  ермітовий, то його власні значення дійсні.

1). Якщо  $\psi$  - спільна власна функція операторів  $\hat{A}$  та  $\hat{B}$ , то

$$\hat{A} \hat{B} \psi = \hat{A} b \psi = b \hat{A} \psi = b a \psi, \\ \hat{B} \hat{A} \psi = \hat{B} a \psi = a \hat{B} \psi = a b \psi.$$

Отже,

$$\hat{A} \hat{B} \psi = \hat{B} \hat{A} \psi \\ [\hat{A} \hat{B}] = 0.$$

і

2). Нехай  $\psi$  - власна функція оператора  $\hat{A}$ , яка належить власному значенню  $a$ . Із комутативності операторів випливає, що

$$\hat{A} \hat{B} \psi = \hat{B} \hat{A} \psi = \hat{B} a \psi = a \hat{B} \psi,$$

тобто

$$\hat{A} \psi' = a \psi', \text{ де } \psi' = \hat{B} \psi.$$

Таким чином власне значення  $a$  належить обом функціям, які описують один і той самий стан. Це може бути лише тоді, коли ці функції відрізняються на сталий множник, наприклад  $b$ :  $\psi' = b \psi$ . Але  $\psi' = \hat{B} \psi$ , тому  $\hat{B} \psi = b \psi$ , тобто  $\psi$  - спільна власна функція операторів  $\hat{A}$  та  $\hat{B}$ .

3). Нехай  $\psi$  - довільна власна функція оператора  $\hat{A}$ , яка відповідає його власному значенню  $a$ . Тоді внаслідок самоспряженості оператора  $\hat{A}$

$$\int \psi^* \hat{A} \psi dx = \int \psi \hat{A}^* \psi^* dx$$

і

$$\hat{A} \int \psi^* \psi dx = \hat{A}^* \int \psi \psi^* dx.$$

Звідси  $\hat{A} = \hat{A}^*$ , що можливе лише при дійсному  $\hat{A}$ .

### Задачі для самостійного розв'язання

**3.1.** Частинка з масою  $m$  рухається в одновимірному потенціальному полі  $U = kx^2/2$  (гармонічний осцилятор). Оцінити за допомогою співвідношення невизначеностей мінімальну можливу енергію частинки у такому полі.

**3.2.** Електрон знаходиться в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками. Ширина ями  $l$  така, що енергетичні рівні розташовані досить густо. Знайти густину рівнів  $dN/dE$ , тобто їх кількість в одиничному інтервалі енергії, як функцію  $E$ . Обчислити  $dN/dE$  для  $E = 1.0$  еВ, якщо  $l = 1.0$  см.

**3.3.** Частинка масою  $m$  знаходиться в тривимірній кубічній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками. Сторона куба дорівнює  $a$ . Знайти:

- а) власні значення енергії частинки;
- б) різницю енергій третього і четвертого рівнів;
- в) енергію шостого рівня і відповідну йому кількість станів (кратність виродження).

**3.4.** Частинка масою  $m$  знаходиться в одновимірному

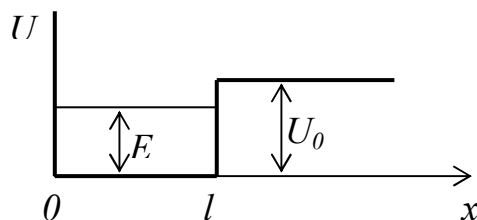


Рис. 3.

потенціальному полі  $U(x)$ , вигляд якого показаний на рис. 3, де  $U(0) = \infty$ . Знайти:

1) рівняння, що визначає можливі значення енергії частинки в області при  $E < U_0$ ; привести це рівняння до вигляду  $\text{sinkl} = \pm kl(\eta^2/(2ml^2U_0))^{1/2}$ , де  $k = (2mE/\eta^2)^{1/2}$ . Показати за допомогою графічного розв'язку цього рівняння, що можливі значення енергії частинки утворюють дискретний спектр;

2) мінімальне значення величини  $l^2U_0$ , при якому виникає перший енергетичний рівень в області при  $E < U_0$ , а також при якому мінімальному значенні  $l^2U_0$  виникне  $n$ -й рівень?

**3.5.** Знайти можливі значення енергії частинки масою  $m$ , що знаходиться у сферично-симетричній потенціальній ямі

$$U(r) = 0 \text{ при } r > r_0 \text{ і } U(r) = \infty \text{ при } r = r_0,$$

для випадку, коли рух частинки описується хвильовою функцією  $\psi(r)$ , яка залежить тільки від  $r$ .

При розв'язуванні рівняння Шредінгера використати підстановку  $\psi(r) = \chi(r)/r$ .

**3.6.** Хвильова функція частинки масою  $m$  для основного стану в одновимірному потенціальному полі  $U(x) = \alpha x^2/2$  має вигляд  $\psi(r) = Ae^{-\alpha x^2}$ , де  $A$  – коефіцієнт нормування,  $\alpha$  – додатня стала. Знайти за допомогою рівняння Шредінгера сталу  $\alpha$  і енергію  $E$  частинки у цьому стані.

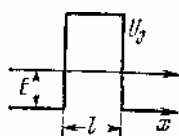
**3.7.** Визначити енергію електрона атома водню у стаціонарному стані, для якого хвильова функція  $\psi(r) = A(1 + ar)e^{-\alpha r}$ , де  $A$ ,  $a$  і  $\alpha$  – деякі сталі.

**3.8.** Хвильова функція електрона в основному стані атома водню має вигляд  $\Psi(r) = Ae^{(-r/r_1)}$ , де  $A$  – деяка стала,  $r_1$  – перший борівський радіус. Знайти:

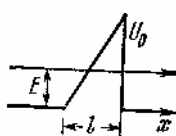
- а) найбільш ймовірну відстань між електроном і ядром;
- б) середнє значення модуля кулонівської сили, яка діє на електрон;
- в) середнє значення потенціальної енергії електрона у полі ядра.

**3.9.** Знайти середній електростатичний потенціал, який створює електрон у центрі атома водню, якщо електрон знаходиться в основному стані, для якого хвильова функція  $\Psi(r) = Ae^{(-r/r_1)}$ , де  $A$  – деяка стала,  $r_1$  – радіус першої борівської орбіти.

**3.10.** Використавши формулу  $D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U-E)} dx\right]$ , знайти



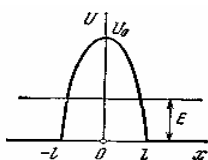
Мал. 3.10 а



Мал. 3.10 б

для електрона з енергією  $E$  ймовірність  $D$  проходження потенціального бар'єру шириною  $l$  і висотою  $U_0$ , якщо бар'єр має форму, показану на малюнках.

**3.11.** Знайти ймовірність  $D$  проходження частинки з масою  $m$  і енергією  $E$  крізь потенціальний бар'єр, де  $U(x) = U_0(1 - x^2/l^2)$ .



Мал. 3.11

**3.12.** Знайти квадрат оператора  $\hat{L} = \frac{d}{dx} + x$ .

**3.13.** Порівняти результат дії операторів  $\hat{L}_1 = (x \frac{d}{dx})^2$  і  $\hat{L}_1 = (\frac{d}{dx} x)^2$ .

**3.14.** Знайти комутатор  $\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx}$ .

**3.15.** Знайти комутатор оператора  $x$  і оператора Лапласа.

**3.16.** Знайти власні значення оператора  $\hat{L}$ , що відповідають власній функції  $\psi_L$ , якщо:

- а)  $\hat{L} = -\frac{d^2}{dx^2}$ ;  $\psi_L = \sin 2x$ ;
- б)  $\hat{L} = (-\frac{d^2}{dx^2} + x^2)$ ,  $\psi_L = \exp(-\frac{x^2}{2})$ ;

$$\text{в) } \hat{L} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx}, \quad \psi_L = \frac{\sin \alpha x}{x}.$$

**3.17.** Знайти власні функції і власні значення таких операторів

а)  $-i \frac{d}{dx}$ , якщо  $\psi(x) = \psi(x+a)$ ,  $a$  - стала;

б)  $-i \frac{d^2}{dx^2}$ , якщо  $\Psi(0)=0$  і  $\Psi(l)=0$ .

**3.18.** Знайти власні функції і власні значення операторів:

а)  $\frac{d}{dx}$  та  $i \frac{d}{dx}$ ;

б)  $(x + \frac{d}{dx})$ ;

в)  $\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{d}{dx}$ ;

г)  $\frac{d}{d\varphi}$ .

**3.19.** Знайти оператор, ермітовспряжений до оператора  $\frac{\partial}{\partial x}$ .

**3.20.** Довести такі теореми:

а) якщо оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  мають спільні власні функції, то такі оператори комутують;

б) якщо оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  комутують, то вони мають спільні власні функції (довести для випадку відсутності виродження).

в) якщо оператор  $\hat{A}$  ермітовий, то його власні значення дійсні.

**3.21.** Довести ермітовність оператора  $\hat{L}^2$ , маючи на увазі, що оператори  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  — ермітові.

## IV. БУДОВА БАГАТОЕЛЕКТРОННИХ АТОМІВ І МОЛЕКУЛ

Найважливіші поняття, закони і формули

Спектральні позначення термів:  ${}^{\kappa}(L)_J$ , де  $\kappa = 2S + 1$  – мультиплетність,  $L, S, J$  – квантові числа орбітального, спінового і повного моментів,

$$L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 \dots$$

$$(L) = S, P, D, F, G, H, I \dots$$

Терми атомів лужних металів:

$$T = R/(n + \alpha)^2,$$

де  $R$  – стала Рідберга,  $\alpha$  – рідбергівська поправка,  $n$  – головне квантове число.

Механічний момент атома:

$$M_L = \eta (L(L + 1))^{1/2}, \text{ аналогічно } M_S \text{ і } M_J.$$

Правила Хунда:

1) найменшу енергію має терм з максимальним значенням  $S$  для даної електронної конфігурації із максимально можливим для цього  $S_{\text{макс}}$  значенням  $L$ ;

2) для основного (нормального) терма  $J = |L - S|$ , якщо підоболонка заповнена менше ніж наполовину, і  $J = L + S$  в інших випадках.

Розподіл Больцмана:

$$N_2/N_1 = g_2/g_1 \exp(-(E_2 - E_1)/(kT)),$$

де  $g_1$  і  $g_2$  – статистичні ваги (кратності виродження) відповідних рівнів.

Закон Мозлі для  $K_{\alpha}$  - ліній:

$$\omega_{K\alpha} = 3/4 R(Z - \sigma)^2,$$

де  $\sigma$  – поправка, що для легких елементів рівна одиниці.

Магнітний момент атома і фактор (множник) Ланде:

$$\mu = g(J(J + 1))^{1/2} \mu_B, \quad g = 1 + (J(J + 1) + S(S + 1) - L(L + 1))/(2J(J + 1)),$$

де  $\mu_B$  – магнетон Бора

Розщеплення спектральних ліній Зеемана у слабкому магнітному полі:

$$\Delta\omega = (m_1 g_1 - m_2 g_2) \mu_B B / \hbar.$$

Для випромінювання вздовж поля зееманівські компоненти, зумовлені переходами  $m_1 = m_2$ , відсутні.

Енергія обертового руху двохатомної молекули:

$$E_J = \hbar^2 J(J + 1) / (2I),$$

де  $I$  – момент інерції молекули.

Енергія коливного руху двохатомної молекули:

$$E_v = \eta \omega / (v + 1/2),$$

де  $\omega$  – власна частота коливань молекули.

Середня енергія квантового гармонічного осцилятора при температурі  $T$ :

$$\langle E \rangle = \eta \omega / 2 + \eta \omega / (\exp(\eta \omega / (kT)) - 1).$$

### Приклади розв'язування задач

**Задача 1.** Знайти поправку Рідберга для  $3P$ -терма атома натрію, перший потенціал збудження якого 2.10 В, а енергія зв'язку валентного електрона в основному  $3S$ -стані 5.14 еВ.

За означенням, терм  $T$  лужних металів

$$T = \frac{R}{(n + \alpha)^2},$$

де  $\alpha$  – рідбергівська поправка. З іншого боку  $3P$ -терм пов'язаний з першим потенціалом збудження  $\phi$  і енергією зв'язку  $E_0$  валентного електрона в основному  $3S$ -стані так:

$$T = E_0 - e\phi.$$

Використовуючи ці два твердження, знайдемо

$$\alpha = \frac{R}{(E_0 - e\phi)^{1/2} - n}.$$

Підставляючи числові значення, одержимо

$$\alpha = \frac{6.6 \cdot 10^{-16} \text{ eB} \cdot c \cdot 2.07 \cdot 10^{16} c}{(5.14 \text{ eB} - 2.10 \text{ eB})^{1/2} - 3} = -0.88.$$

**Задача 2** Атом перебуває у стані з мультиплетністю, рівною трьом, і повним механічним моментом –  $\hbar(20)^{1/2}$ . Яким може бути квантове число  $L$ ?

Знаючи мультиплетність, знайдемо передусім спінове квантове число

$$\kappa = 2S + 1,$$

тут при

$$\kappa = 3 \text{ маємо } S = 1.$$

З повного механічного моменту знайдемо відповідне квантове число  $J$

$$M_J = \eta (J(J + 1))^{1/2},$$

$$\hbar (20)^{1/2} = \eta (J(J + 1))^{1/2},$$

тому

$$J = 4.$$

Згідно векторної моделі

$$\vec{L} = \vec{J} - \vec{S}.$$

Отже, тут можливі значення  $L = |J - S|, \dots, J + S$ , а саме 3, 4, 5.

**Задача 3.** Використовуючи правила Хунда, знайти основний терм атома, незаповнена підоболонка якого містить:

1) три  $d$ -електрони; 2) сім  $d$ -електронів.

1). Три електрони заповнюють  $p$  оболонку менше ніж до половини, отже

$$S = 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3/2,$$

$$L = 2 + 1 + 0 = 3,$$

а отже,

$$J = L - S = 3 - 3/2 = 3/2.$$



А основний терм атома  ${}^4F_{3/2}$ .

а) Сім електронів заповнюють більше половини  $d$  оболонки, отже

$$S = 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 - 1/2 - 1/2 = 3/2,$$

$$L = 2 + 1 + 0 - 1 - 2 + 2 + 1 = 3,$$

а тому

$$J = L + S = 3 + 3/2 = 9/2.$$

Основний же терм атома –  ${}^4F_{9/2}$ .

**Задача 4.** Визначити кутову швидкість обертання молекули  $S_2$ , що перебуває на першому збудженому обертовому рівні, якщо відстань між її ядрами  $d = 189$  пм.

Момент інерції двохатомної молекули

$$I = \frac{md^2}{4}.$$

Прирівнюючи квантовомеханічне і класичне визначення енергії обертового руху двохатомної молекули, запишемо

$$\frac{I\omega^2}{2} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I}.$$

З наведених вище співвідношень

$$\omega = \frac{4\hbar\sqrt{J(J+1)}}{md^2}.$$

Отже,

$$\omega = \frac{4 \cdot 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \cdot \sqrt{1(1+1)}}{2 \cdot 32.064 \cdot 1.660 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \cdot (1.89 \cdot 10^{-10} \text{ м})^2} = 1.57 \cdot 10^{11} \frac{\text{рад}}{\text{с}}.$$

### Задачі для самостійного розв'язання

**4.1.** Поправка Рідберга для основного  $3S$  стану **Na** дорівнює  $\sigma_{l=0} = -1.373$ . Атом перебуває у збудженому  $4P$  стані. Безпосередньому переходу  $4P \rightarrow 3S$  відповідає лінія з довжиною хвилі  $\lambda = 3303 \text{ \AA}$ . Визначити, які ще лінії можуть виникати при переході атома зі збудженого стану  $4P$  в основний стан  $3S$ .

**4.2.** Енергія зв'язку валентного електрона атома літію в станах  $2S$  і  $2P$  дорівнює відповідно 5.39 і 3.54 еВ. Обчислити рідбергівські поправки для  $S$ - і  $P$ -термів цього атома.

**4.3.** Знайти поправку Рідберга для  $3P$ -терма атома натрію, перший потенціал збудження якого 2.10 В, а енергія зв'язку валентного електрона в основному  $3S$ -стані 5.14 еВ.

**4.4.** Відомі три лінії спектру натрію з довжинами хвиль  $\lambda_1 = 616.1$  нм,  $\lambda_2 = 589.6$  нм,  $\lambda_3 = 285.3$  нм. Визначити, які з них належать до головної серії, коли відомо, що переходові  $4P \rightarrow 3S$  відповідає лінія з  $\lambda = 330.3$  нм, а довжина хвилі межі головної серії дорівнює  $\lambda_0 = 241.3$  нм.

**4.5.** Знайти енергію зв'язку валентного електрона в основному стані атома літію, якщо відомо, що довжина хвилі головної лінії

різкої серії  $\lambda_1 = 813$  нм і довжина хвилі короткохвильової межі цієї серії  $\lambda_2 = 350$  нм.

**4.6.** Визначити довжини хвиль спектральних ліній, які виникають при переході збуджених атомів літію зі стану  $3S$  в основний стан  $2S$ . Поправки Рідберга для  $S$ - і  $P$ -термів рівні  $-0.41$  і  $-0.04$ .

**4.7.** Довжини хвиль компонент жовтого дублету резонансної лінії натрію, обумовлені переходом  $3P \rightarrow 3S$ , дорівнюють  $589.00$  і  $589.56$  нм. Знайти величину розщеплення  $3P$ -терма в еВ.

**4.8.** Головна лінія різкої серії атомарного цезію є дублетом з довжинами хвиль  $1358.8$  і  $1469.5$  нм. Знайти інтервали в частотах між компонентами наступних ліній цієї серії.

**4.9.** Записати спектральне позначення термів атома водню, електрон якого перебуває у стані з головним квантовим числом  $n=3$ .

**4.10.** Оцінити величину розщеплення рівня  $n = 2$  атома водню Бора, зумовлену спин-орбітальною взаємодією.

**4.11.** Обчислити квантові дефекти  $s$ -,  $p$ - і  $d$  термів атома літію, якщо відомо, що енергія зв'язку валентного електрона в основному стані рівна  $5.39$  еВ, перший потенціал збудження  $1.85$  В, а довжина хвилі головної лінії дифузної серії  $610$  нм. Який із перерахованих термів найближчий до воднеподібного і чим це зумовлено?

**4.12.** Один електрон атома перебуває у стані  $P$ , а другий у стані  $F$ . Обчислити максимальне і мінімальне значення кута між їх моментами імпульсу.

**4.13.** Один атом перебуває у стані  $P$ , а другий у стані  $F$ . Кількість значень квантового числа  $L$  у першому випадку дорівнює  $3$ , у другому -  $4$ . Визначити значення спінового квантового числа  $S$  в обидвох станах.

**4.14.** Скільки і яких квантових чисел  $J$  може набувати атом у стані з квантовими числами  $S$  і  $L$ , рівними:

а)  $2$  і  $3$ ; б)  $3$  і  $3$ ; в)  $5/2$  і  $2$  ?

**4.15.** Знайти можливі значення повних механічних моментів атомів, які перебувають у станах  $^4P$  і  $^5D$ .

**4.16.** Знайти максимальний повний механічний момент і спектральне позначення терма атома:

а) натрію, валентний електрон якого має головне квантове число  $n = 4$ ;

б) з електронною конфігурацією  $1s^2 2p 3d$ .

**4.17.** Відомо, що у  $F$ - і  $D$ - станах кількість можливих значень квантового числа  $J$  однакове і рівне п'яти. Визначити спіновий механічний момент у цих станах.

**4.18.** Знайти можливі терми станів атома –  $^3S$ ,  $^2P$ ,  $^5D$ .

4.19. Визначити можливі мультиплетності термів (тобто значення  $(2s+1)$ ) для атомів **Li, Be, B, C, N**.

4.20. Атом перебуває у стані з мультиплетністю рівною трьом і повним механічним моментом  $-\hbar(20)^{1/2}$ . Яким може бути квантове число  $L$ ?

4.21. Знайти можливі мультиплетності к термів:

а)  ${}^kD_2$ ; б)  ${}^kP_{3/2}$ ; в)  ${}^kF_1$ .

4.22. Певний атом, крім заповнених оболонок, має три електрони ( $s$ ,  $p$  і  $d$ ) і перебуває у стані з максимально можливим для цієї конфігурації повним механічним моментом. Знайти у векторній моделі атома кут між спіновим і повним механічними моментами цього атома.

4.23. У наближенні  $L$ - $S$  – зв'язку знайти можливі значення термів для конфігурації при  $npn'p$  при  $n \neq n'$  і  $np^2$ .

4.24. Виписати спектральні символи термів двохелектронної системи, яка складається з одного  $p$ -електрона і одного  $d$ -електрона.

4.25. Знайти основний терм атома марганцю **Mn**, який має електронну конфігурацію  $Ar + 3d^5 4s^2$ .

4.26. Встановити, які з наведених нижче переходів заборонені правилами відбору:  ${}^2D_{3/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$ ,  ${}^3P_1 \rightarrow {}^2S_{1/2}$ ,  ${}^3F_3 \rightarrow {}^3P_2$ ,  ${}^4F_{7/2} \rightarrow {}^4D_{5/2}$ .

4.27. Знайти кратність виродження станів  ${}^2P$ ,  ${}^3D$  і  ${}^4F$  з максимально можливими значеннями повного механічного моменту.

4.28. Записати спектральне позначення терма, кратність виродження якого рівна сімом, а квантові числа  $L$  і  $S$  зв'язані співвідношенням  $L = 3S$ .

4.29. Визначити, які лінії виникають у магнітному полі при переходах  ${}^1D \rightarrow {}^1P$  і  ${}^1F \rightarrow {}^1D$ .

4.30. Використовуючи правила Хунда, знайти основний терм атома, незаповнена підоболонка якого містить:

а) три  $d$ -електрони; б) сім  $d$ -електронів.

4.31. Користуючись правилами Хунда, знайти число електронів в єдиній незаповненій підоболонці атома, основний терм якого:

а)  ${}^3F_2$ ; б)  ${}^2P_{3/2}$ ; в)  ${}^6S_{5/2}$ .

4.32. Єдина незаповнена підоболонка певного атома містить три електрони, причому основний терм атома має  $L = 3$ . За допомогою правил Хунда знайти спектральний символ основного стану цього атома.

4.33. Спектральний прилад може розділити дві лінії, якщо відстань між ними у довжинах хвиль  $\Delta\lambda = 0.05$  нм. Визначити величину магнітного поля  $B$ , необхідну для спостереження нормального ефекту Зеемана (вздовж поля), при дублетному розщепленні лінії з  $\lambda = 600.0$  нм.

**4.34.** Атом алюмінію **Al** має основний стан  ${}^2P_{1/2}$ , атом іридію **Ir** –  ${}^4F_{9/2}$ . Визначити, на скільки ліній розщепиться пучок цих атомів у досліді Штерна і Герлаха.

**4.35.** У досліді Штерна і Герлаха пучок атомів ніобію в основному стані  ${}^6D_{1/2}$  рухається у неоднорідному магнітному полі з градієнтом  $\partial V/\partial z = 10^3$  Тл м<sup>-1</sup>. Відомо:  $l_1 = 5$  см,  $l_2 = 20$  см, швидкість атомів  $v = 3 \cdot 10^4$  см с<sup>-1</sup>. Визначити відстань  $2\Delta l$  між слідами пучка на екрані.

**4.36.** Швидкість електрона, що підлітає до антикатада рентгенівської трубки,  $v = 10^{10}$  см с<sup>-1</sup>. Визначити короткохвильову межу гальмівного рентгенівського випромінювання.

**4.37.** Обчислити поправку  $\sigma$  для таких ліній  $K$ -серії міді:  $\lambda_{K\alpha} = 0.154$  нм,  $\lambda_{K\beta} = 0.139$  нм,  $\lambda_{K\gamma} = 0.137$  нм.

**4.38.** Енергії зв'язку електронів на  $K$ - і  $L$ - оболонках в атомі ртуті рівні відповідно 83.1 кеВ і 14.8 кеВ. Визначити довжину хвилі монохроматичного рентгенівського випромінювання, для якої кінетична енергія фотоелектрона, вивільненого з  $K$ -оболонки, у два рази менша від кінетичної енергії вивільненого Оже-електрона.

**4.39.** Потенціал збудження  $K$ -серії ртуті дорівнює 83.1кВ, а границя  $L$  - серії – відповідно  $E_{L I} = 14.8$  кВ,  $E_{L II} = 14.2$  кВ,  $E_{L III} = 12.3$  кВ. Обчислити за цими даними довжини хвиль триплета  $K_{\alpha}$ - лінії.

**4.40.** Обчислити за допомогою закону Мозлі:

- а) довжину хвилі  $K_{\alpha}$ -лінії алюмінію і кобальту;
- б) різницю енергій зв'язку  $K$ - і  $L$ -електронів ванадію.

**4.41.** Знайти напругу на рентгенівській трубці з нікелевим антикатодом, якщо різниця довжин хвиль  $K_{\alpha}$  - лінії і короткохвильової межі суцільного рентгенівського спектру дорівнює 84 пм.

**4.42.** Обчислити товщину алюмінієвої фольги, необхідної для поглинання рентгенівського випромінювання з довжиною хвилі  $\lambda = 0.194$  нм<sup>0</sup> у 40 разів, якщо відомо, що масовий коефіцієнт поглинання дорівнює у цьому разі  $\mu = 9.4$  м<sup>2</sup> кг<sup>-1</sup>. Визначити також лінійний і атомний коефіцієнти поглинання цих променів.

**4.43.** Масовий коефіцієнт поглинання заліза для випромінювання  $\lambda = 0.0209$  нм<sup>0</sup> такий:  $\mu = 0.126$  м<sup>2</sup> кг<sup>-1</sup>. Обчислити лінійні і атомні коефіцієнти поглинання і розсіювання цих променів.

**4.44.** Яка відносна частка атомів водню знаходиться у стані з головним квантовим числом  $n = 2$  при температурі  $T = 3000$  К?

**4.45.** Обчислити середній час життя збуджених атомів, якщо відомо, що інтенсивність спектральної лінії, зумовленої переходом в

основний стан, зменшується в  $\eta = 25$  раз на відстані  $l = 2.5$  мм вздовж пучка атомів, швидкість яких  $v = 600$  м/с.

**4.46.** Атомарний літій з концентрацією  $n = 3.6 \cdot 10^{16}$  см<sup>-3</sup> перебуває при температурі  $T = 1500$  К. При цьому потужність випромінювання резонансної лінії  $\lambda = 671$  нм ( $2P \rightarrow 2S$ ) в розрахунку на одиницю об'єму газу  $P = 0.30$  Вт/см<sup>3</sup>. Знайти середній час життя атомів літію у стані резонансного збудження.

**4.47.** Довжина хвилі резонансної лінії ртуті  $\lambda = 253.65$  нм. Середній час життя атомів ртуті у стані резонансного збудження  $\tau = 0.15$  мкс. Оцінити відношення доплерівського розширення цієї лінії до її природньої ширини при температурі газу  $T = 300$  К.

**4.48.** Визначити кутову швидкість обертання молекули  $S_2$ , що перебуває на першому збудженому оберտальному рівні, якщо відстань між її ядрами  $d = 189$  пм.

**4.49.** Показати, що інтервали частот між сусідніми спектральними лініями оберտального спектру двохатомної молекули мають однакову величину. Знайти момент інерції і відстань між ядрами молекули **CN**, якщо інтервали між сусідніми лініями оберտального спектру цих молекул  $\Delta\omega = 5.47 \cdot 10^{12}$  рад/с.

**4.50.** Знайти для двохатомної молекули  $dN/dE$  (число оберտальних рівнів на одиничний інтервал енергії) як функції енергії оберտального руху  $E$ . Обчислити цю величину для молекули йоду у стані з обертальним квантовим числом  $J = 10$ . Відстань між ядрами цієї молекули дорівнює 267 пм.

**4.51.** Власна частота коливань молекули водню дорівнює  $8.25 \cdot 10^{14}$  рад·с<sup>-1</sup>, відстань між ядрами – 74 пм. Знайти відношення кількості цих молекул на першому збудженому коливному рівні ( $n = 1$ ) до кількості молекул, що перебувають на першому збудженому обертальному рівні ( $J = 1$ ) при температурі  $T = 875$  К. Кратність виродження обертальних рівнів вважати рівною  $2J + 1$ .

**4.52.** Обчислити довжини хвиль червоного і фіолетового супутників, найближчих до незміщеної лінії коливного спектру комбінаційного розсіювання молекул **F<sub>2</sub>**, якщо довжина хвилі падаючого світла  $\lambda_0 = 404.7$  нм і власна частота коливань молекули  $\omega = 2.15 \cdot 10^{14}$  рад с<sup>-1</sup>.

**4.53.** Розглянути можливі типи коливань таких лінійних молекул:

а) **CO<sub>2</sub>** (**O - C - O**); б) **C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>** (**H - C - C - H**).

## ВІДПОВІДІ

1.1. а)  $r = \frac{3e^2}{24\pi \varepsilon_0 E} \approx 1.6 \cdot 10^{-10} \text{ м} ; \text{б) } \omega = \left( \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 m r^3} \right)^{1/2} ;$

$r = \left( \frac{e^2 \lambda^2}{16\pi^3 \varepsilon_0 c^2 m} \right)^{1/3} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м} .$

1.2. а)  $r = \frac{2Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 T} \approx 5.9 \cdot 10^{-12} \text{ м} ; \text{б) } R = \frac{2Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 T} \cdot \frac{m_\alpha + M}{m_\alpha} = 3.7 \cdot 10^{-13} \text{ м} .$

1.4.  $b = \frac{Z_1 Z_2 m e^2}{4\pi \varepsilon_0 p^2 t g \frac{\theta}{2}} \approx 6 \cdot 10^{-13} \text{ м} .$  1.5.  $T' = p^2 \frac{(m_1 - m_2)^2}{m_1 + m_2} .$

1.6.  $T_e = \frac{m_p e^4}{4\pi \varepsilon_0 m_e b^2 T} = 4 \text{ eB} .$

1.7. а)  $|\Delta p| = \left( \frac{8mT}{1 + \left( \frac{4\pi \varepsilon_0 b T}{Ze^2} \right)^2} \right)^{1/2} \approx 1.3 \cdot 10^2 \frac{\text{MeB}}{c} ; \text{б) } T = \frac{Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 b} \approx 1.3 \text{ MeB} ; \theta = \frac{\pi}{2} .$

1.8.  $r_{\min} = \frac{2Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 T} \approx 3.94 \cdot 10^{-14} \text{ м} .$  1.10.  $b = \frac{Ze^2 (m_1 + m_2)}{4\pi \varepsilon_0 m_2 E_0 t g \frac{\theta}{2}} \approx 8.6 \cdot 10^{-15} \text{ м} ;$

$r_{\min} = \frac{2Ze^2 (m_1 + m_2)}{4\pi \varepsilon_0 m_2 E_0} \approx 4.6 \cdot 10^{-15} \text{ м} .$  1.11. а)  $\cos \frac{\theta}{2} = \frac{b}{R+r} ; \text{б) } dP = \frac{\sin \theta d\theta}{2} ; \text{в) } P = \frac{1}{2} .$

1.13.  $\Delta \sigma = 4\pi \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| \sin^2 \frac{\theta_0}{2} = 5.5 \cdot 10^{-26} \text{ м}^2 .$  1.15.  $\frac{\Delta N}{N} = 3.3 \cdot 10^{-5} .$

1.16.  $\Delta N = I t \frac{N_A}{A} \rho d_0 \left( \frac{Ze^2 (m_1 + m_2)}{8\pi \varepsilon_0 E_0 m_2} \right)^2 \frac{\Delta \Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \approx 6.7 \cdot 10^4 \text{ м}^{-2} ; \frac{\Delta N_{Al}}{\Delta N_{Au}} \approx 0.035 .$

1.17.  $Z_{Pt} = Z_{Ag} \left( \frac{A_{Pt}}{A_{Ag}} \right)^{1/2} = 78 .$  1.18. а)  $N = 1.6 \cdot 10^6 ;$

б)  $N = I_0 \tau \pi n d \left( \frac{Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 T} \right)^2 c t g^2 \frac{\theta_0}{2} = 2.0 \cdot 10^7 .$  1.19.  $t = \frac{3mc^3}{8\pi \varepsilon_0 e^2 \omega^2} \ln \eta = 15 \text{ нс} .$

1.20.  $t = \frac{m^2 c^3 r^3}{64 \pi^2 \varepsilon_0^2 e^4} = 13 \text{ нс} .$  1.23.  $r_n = \left( \frac{n\eta}{m\omega} \right)^{1/2} ; E_n = n\eta\omega , n = 1, 2, \dots , \omega = \left( \frac{k}{m} \right)^{1/2} .$

$$1.24. \quad n = \frac{1 + \sqrt{1 + 8N}}{2} = 4; \quad \lambda_1 = 0.97 \cdot 10^{-7} \text{ м}; \quad \lambda_2 = 4.85 \cdot 10^{-7} \text{ м}; \quad \lambda_3 = 1.88 \cdot 10^{-6} \text{ м};$$

$$\lambda_4 = 1.03 \cdot 10^{-7} \text{ м}; \quad \lambda_5 = 6.58 \cdot 10^{-7} \text{ м}; \quad \lambda_6 = 1.22 \cdot 10^{-7} \text{ м}. \quad 1.25. \quad N = \frac{n(n-1)}{2}.$$

$$1.27. \text{Серія Брекета, } \lambda_{6 \rightarrow 4} = 2.63 \text{ мкм}. \quad 1.28. \text{He}^+. \quad 1.29. \quad R = \frac{176\pi c}{15Z^2 \Delta\lambda} = 2.07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}.$$

$$1.30. \quad \lambda = \frac{\frac{2\pi c}{\Delta\omega} \left( \left( \frac{ZR}{\Delta\omega} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right)}{2Z \left( \frac{R}{\Delta\omega} \right)^{\frac{1}{2}} - 1} = 0.47 \text{ мкм}. \quad 1.31. \quad E_{3g} = 54.4 \text{ eB} (\text{He}^+).$$

$$1.32. \quad v = \left( \frac{2(\eta\omega - 4\eta R)}{m} \right)^{\frac{1}{2}} = 2.3 \cdot 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}}. \quad 1.33. \quad T_{\min} = \frac{3\eta R}{2} = 20.5 \text{ eB}.$$

$$1.34. \quad v = \frac{3\eta R}{4mc} = 3.25 \text{ м/с}. \quad 1.36. \quad \frac{m_e}{m} = \frac{1}{3729}. \quad 1.37.$$

$$\lambda_{H_\alpha} - \lambda_{D_\alpha} = \frac{36}{5R_\infty} \left( \frac{m_e}{m_H} - \frac{m_e}{m_D} \right) \cong 0.1786 \text{ нм}; \quad \lambda_{H_\gamma} - \lambda_{D_\gamma} = \frac{16}{3R_\infty} \left( \frac{m_e}{m_n} - \frac{m_e}{m_D} \right) \approx 0.1321 \text{ нм}.$$

$$1.39. \quad E_n = \frac{R_\infty}{2\eta n^2}; \quad E_i = \frac{R_\infty}{2\eta} \approx 9.7999 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}; \quad \lambda_{pe3} = \frac{8}{3R_\infty} = 243.09 \text{ нм}. \quad 1.40.$$

$$E_n = - \frac{Z^2 R_\infty \eta \frac{m_\mu}{m_e}}{1 + \frac{m_\mu}{m_e}} \cdot \frac{1}{n^2}; \quad E_1 = 2538 \cdot Z^2 \text{ eB}; \quad a_0 = \frac{4\pi \varepsilon_0 \eta^2 (1 + \frac{m_\mu}{m_e})}{Ze^3 m_\mu} \approx \frac{2.8 \cdot 10^{-13}}{Z} \text{ м}. \quad 1.41.$$

$$E_n = - \frac{Z^2 e^4 m_e m_H}{32\pi^2 \varepsilon^2 \varepsilon_0 \eta^2 (m_e + m_H)} \cdot \frac{1}{n^2}; \quad E_1 = 0.07 \text{ eB}; \quad r_1 = \frac{4\pi \varepsilon \varepsilon_0 \eta^2 (m_e + m_H)}{Ze^2 m_e m_H} \approx 10^{-8} \text{ м}.$$

$$1.42. \quad \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{\left( \frac{n}{2} \right)^2} - \frac{1}{\left( \frac{m}{2} \right)^2} \right); \quad n = 4; \quad m = 6.$$

$$1.43. \quad \lambda_H - \lambda_{H\delta} = \frac{5R_\infty}{36} \left( \frac{m_\delta}{m_H} - \frac{m_\delta}{m_{H\delta}} \right) \lambda^2 \approx 2.69 \cdot 10^{-10} \text{ м} \quad 1.44. \quad \frac{m_H}{m_e} = \frac{R_H}{R_\infty - R_H} \cong 1837.15;$$

$$\frac{m_{He}}{m_e} = \frac{R_\infty - R_H}{R_\infty - R_{He}} \cong 3.978. \quad 1.45.$$

$$\frac{e}{m_e} = \frac{F}{R_D - R_H} \left( \frac{R_H}{\mu_H - N_A m_e} - \frac{R_D}{\mu_D - N_A m_e} \right) \approx 1.76 \cdot 10^{11} \frac{\text{Кл}}{\text{кг}}.$$

$$2.1. \quad \lambda = \frac{2\pi \eta c}{\sqrt{T^2 + 2mc^2 T}} \approx 8.72 \cdot 10^{-13} \text{ м}. \quad 2.2. \quad \lambda = \frac{2\pi \eta}{\left( 2mT \left( 1 + \frac{T}{2mc^2} \right) \right)^{\frac{1}{2}}};$$

$$T \leq \frac{4mc^2 \Delta\lambda}{\lambda} = 20.4 \text{ кеВ} \text{ (для електрона) і } 37.5 \text{ МеВ (для протона)}.$$

$$2.3. T = mc^2 \left( 2^{1/2} - 1 \right) = 0.21 \text{ МеВ}. 2.5. \lambda = \frac{2\pi \hbar c}{T} = 12.4 \cdot 10^{-15} \text{ м}.$$

$$2.6. \text{ Для обох частинок } \lambda = \frac{2\pi \hbar}{\left( 1 + \frac{m_n}{m_d} \right) (2m_n T)^{1/2}} = 8.6 \text{ нм}. \quad 2.7. \lambda_n = \frac{2\varepsilon_0 \hbar^2}{Zme^2} n;$$

$$\lambda_n = 2\pi r_n = \frac{2\varepsilon_0 \hbar^2}{Zme^2} n^2. 2.8. \lambda = \frac{\hbar \varphi}{m\lambda\Omega} = 9.3 \text{ нм}; \quad \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{a}{R\varphi} \approx 0.73.$$

$$2.9. U_0 = \frac{\pi^2 \eta^2}{2m e \left( \eta^{1/2} - 1 \right)^2 d^2 \sin^2 \theta} = 0.15 \text{ кеВ}. 2.10. d = \frac{\pi \hbar k}{(2mT)^{1/2}} \cos \frac{\theta}{2} = 0.21 \text{ нм}, \text{ де } k$$

$$= 4. \quad 2.13. E = -\frac{\mu e^4}{8\pi^2 \varepsilon_0^2 \eta^2}; \quad \bar{r} = \frac{\pi \varepsilon_0 \eta^2}{\mu e^2}; \quad E = \frac{1}{2} \eta \omega_0; \quad \bar{x} = \left( \frac{\eta}{2\mu\omega_0} \right)^{1/2}.$$

$$2.14. E \approx -\frac{\eta^2}{8\mu\sqrt{r^2}}.$$

$$2.15. \delta = \frac{\eta l}{(mv)^{1/2}} = 0.01 \text{ мм}. 2.16. \Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{c\Delta t} = 0.8 \cdot 10^{-4} \text{ нм}; \quad \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\lambda}{ct} \approx 1.7 \cdot 10^{-7}.$$

$$2.17. \Delta U = -\frac{1}{2} \left( \frac{e^3 E}{\pi \varepsilon_0} \right)^{1/2}; \quad E = \frac{4\pi \varepsilon_0 V^2}{e} \approx 1.41 \cdot 10^{10} \frac{\text{В}}{\text{м}}. 2.18. E_n = \frac{n^2 \pi^2 \eta^2}{2ml^2}, \text{ де } n = 1, 2,$$

$$\dots 2.19. \Delta t \approx \frac{\eta ml^2}{\eta} \approx 10^{-16} \text{ с}.$$

$$3.1. E_{\min} \approx \frac{\eta}{\left( \frac{k}{m} \right)^{1/2}}. 3.2. \frac{dN}{dE} = l \frac{\left( \frac{m}{2E} \right)^{1/2}}{\pi \eta}, \text{ при } E = 1 \text{ еВ величина } \frac{dN}{dE} = 0.8 \cdot 10^7 \text{ рівнів/еВ}.$$

$$3.3. \text{ а) } E = \frac{(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \pi^2 \eta^2}{2ma^2}, \text{ де } n_1, n_2, n_3 - \text{цілі числа не рівні нулю; б) } \Delta E = \frac{n^2 \eta^2}{ma^2};$$

$$\text{в) для 6-го рівня } n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 14 \text{ і } E = \frac{7\pi^2 \eta^2}{ma^2}, \text{ кількість станів дорівнює шести (вона}$$

$$\text{рівна кількості перестановок трійки чисел 1, 2 і 3). 3.5. } E_n = \frac{n^2 \pi^2 \eta^2}{2mr_0^2}.$$

$$3.6. \alpha = \frac{m\omega}{2\eta}; E = \frac{\eta\omega}{2}; \text{ де } \omega = \left( \frac{k}{m} \right)^{1/2}. 3.7. E = -\frac{me^4}{8\eta^2}, \text{ тобто } n = 2.$$

$$3.8. \text{ а) } dP = \psi^2(r_0) 4\pi r^2 dr; \quad r_{\text{нн}} = r_1; \text{ б) } \langle F \rangle = \frac{2e^2}{4\pi \varepsilon_0 r_1^2}; \text{ в) } \langle U \rangle = -\frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 r_1}.$$

$$3.9. \varphi_0 = \int \frac{\rho}{r} 4\pi r^2 dr = \frac{e}{4\pi \varepsilon_0 r_1}, \text{ де } \rho = e\psi^2 - \text{об'ємна густина заряду}.$$



$$3.10. \text{ а) } D \approx \exp \left[ -\frac{2l(2m(U_0 - E))^{\frac{1}{2}}}{\eta} \right]; \text{ б) } D \approx \exp \left[ -\frac{8l(2m)^{\frac{1}{2}}(U_0 - E)^{\frac{3}{2}}}{3\eta U_0} \right].$$

$$3.11. D \approx \exp \left[ -\frac{\pi l(2m)^{\frac{1}{2}}(U_0 - E)}{\eta(U_0)^{\frac{1}{2}}} \right]. \quad 3.12. \hat{L}^2 = \frac{d^2}{dx^2} + 2x \frac{d}{dx} + x^2 + 1. \quad 3.13.$$

$$\hat{L}_1 = x \frac{d}{dx} + x^2 \frac{d^2}{dx^2}; \quad \hat{L}_2 = x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 3x \frac{d}{dx} + 1. \quad 3.14. \frac{\hat{d}}{dx} \hat{x} - \hat{x} \frac{\hat{d}}{dx} = 1. \quad 3.15.$$

$$\hat{x}\Delta - \Delta\hat{x} = -2 \frac{d}{dx}. \quad 3.16. \text{ а) } \lambda = 4; \text{ б) } \lambda = 1; \text{ в) } \lambda = -\alpha^2. \quad 3.17. \text{ а) } \psi = Ce^{i\lambda x}, \lambda = \frac{2\pi}{a}n; \text{ б) }$$

$$\psi = C_1 e^{i\sqrt{\lambda}x} + C_2 e^{-i\sqrt{\lambda}x}, \lambda = \frac{\pi^2}{\lambda^2} n^2 (n = 0, \pm 1, K).$$

$$3.18. \text{ а) } \psi = \psi_0 e^{\lambda x}, \lambda = i\beta \text{ (}\beta \text{ - дійсне число)}; \psi = \psi_0 e^{-i\lambda x}, \lambda \text{ - довільне число};$$

$$\text{ б) } \psi = \psi_0 e^{\left(-\frac{x^2}{2} + \lambda x\right)}, \lambda \text{ - довільне число}; \text{ в) } \psi(x) = C \frac{\sin \beta x}{x}, \beta \text{ - дійсне число};$$

$$\text{ г) } \psi = \psi_0 e^{\lambda \varphi}, \lambda = im \text{ (} m = 0, \pm 1, K \text{)}. \quad 3.19. \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^* = -\frac{\partial}{\partial x}.$$

$$4.1. v_1 = \frac{R}{4 + \sigma_{\lambda=0}} - \frac{R}{4 + \sigma_{\lambda=1}} = 4.66 \cdot 10^5 \text{ м}^{-1}; v_2 = \frac{R}{3 + \sigma_{\lambda=1}} - \frac{R}{4 + \sigma_{\lambda=1}} = 1.32 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1};$$

$$v_3 = \frac{R}{3 + \sigma_{\lambda=0}} - \frac{R}{3 + \sigma_{\lambda=1}} = 1.71 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}. \quad 4.2. \sigma_{l=0} = -0.41; \sigma_{l=1} = -0.04. \quad 4.4. \lambda_1, \lambda_3.$$

$$4.5. E_{3g} = \frac{\eta R}{\left( \left( \frac{R\lambda_1\lambda_2}{2\pi c\Delta\lambda} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right)^2} = 5.3 \text{ eB}. \quad 4.6. \lambda = 0.82 \text{ мкм} (3S \rightarrow 2P); \lambda = 0.68 \text{ мкм} (2P \rightarrow 2S).$$

$$4.7. \Delta E = \frac{2\pi \eta c \Delta\lambda}{\lambda^2} = 2.0 \text{ meB}. \quad 4.8. \Delta\omega = 1.05 \cdot 10^{14} \text{ рад/с}. \quad 4.9. 3S_{1/2}, 3P_{1/2}, 3P_{3/2}, 3D_{3/2}, 3D_{5/2}.$$

$$4.10. \Delta E = \frac{\mu_B^2}{32a_1^3} \approx 1.13 \text{ eB}. \quad 4.11. \sigma = \left( \frac{\eta c R}{E_{3g}} \right)^{\frac{1}{2}} - n; \sigma_1 = 0.41, \sigma_2 = 0.04, \sigma_3 = 0.00.$$

$$4.12. \cos \alpha = \frac{L(L+1)-14}{4\sqrt{6}}; \alpha_{\min} = 52,24^\circ; \alpha_{\max} = 144,75^\circ. \quad 4.13. S_1 = 1, S_2 = \frac{3}{2}.$$

$$4.14. \text{ а) } 1, 2, 3, 4, 5; \text{ б) } 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6; \text{ в) } 1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2. \quad 4.15. \text{ Для стану } ^4P: \frac{\eta(3)^{\frac{1}{2}}}{2},$$

$$\frac{\eta(15)^{\frac{1}{2}}}{2}, \frac{\eta(35)^{\frac{1}{2}}}{2}; \text{ для стану } ^5D: 0, \eta(2)^{\frac{1}{2}}, \eta(6)^{\frac{1}{2}}, \eta(12)^{\frac{1}{2}}, \eta(20)^{\frac{1}{2}}.$$

$$4.16. \text{ а) } ^2F_{7/2} : M_{\max} = \frac{\eta(63)^{\frac{1}{2}}}{2}; \text{ б) } ^3F_4 : M_{\max} = 2\eta(5)^{\frac{1}{2}}. \quad 4.17. \text{ В } F\text{-стані } M_s = \eta(6)^{\frac{1}{2}};$$

$$\text{ для } D\text{-стану можна тільки встановити, що } M_s \geq \eta(6)^{\frac{1}{2}}.$$

$$4.18. ^3S_1; ^2P_{1/2}; ^2P_{3/2}; ^5D_0; ^5D_1; ^5D_2; ^5D_3; ^5D_4. \quad 4.19. C : 2S+1 = 5, 3, 1;$$

$$N : 2S+1 = 6, 4, 2; Li : 2S+1 = 2; Be : 2S+1 = 3, 1; B : 2S+1 = 4, 2. \quad 4.21. \text{ а) } 1, 3, 5, 7, 9;$$

б) 2, 4, 6; в) 5, 7, 9. 4.22.  $31^\circ$ . 4.23.  $^1S_0$ ;  $^3P_{2,1,0}$ ;  $^1D_2$ . 4.24.  $^1P_1$ ,  $^1D_2$ ,  $^1F_3$ ,  $^3P_{0,1,2}$ ,  $^3D_{0,1,2}$ ,  $^3F_{2,3,4}$ . 4.25.  $^6S_{5/2}$ .

4.26. Другий і третій. 4.27. 4, 7 і 10. 4.28.  $^3F_3$ . 4.29.  $\omega - \omega_0 = \omega_L \Delta M_J = 0, \pm \omega_L$ .

4.31. а) Два  $d$  - електрони; б) п'ять  $p$  - електронів; в) п'ять  $d$  - електронів. 4.32.  $^4F_{3/2}$ .

4.33.  $B = \frac{2\pi m_e c}{e\lambda^2} \Delta\lambda \approx 0.7445 \cdot T_{\text{Л}}$ . 4.34.  $n = 10$ . 4.35.

$2 \cdot \Delta\lambda = -\frac{gM_J}{2mv^2} \frac{\partial B}{\partial Z} \lambda_1 (\lambda_1 + 2\lambda_2) = 1.25 \text{ м}$ . 4.36.  $\lambda = \frac{2\pi\eta}{mc} \left( \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right)^{-1} \approx 0.4 \text{ А}$ . 4.37.

$\frac{1}{\lambda} = R(Z-\sigma)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ ;  $\sigma_\alpha = 0.90$ ;  $\sigma_\beta = 1.86$ ;  $\sigma_\gamma = 2.42$ . 4.38.  $\eta\omega = 109.85 \text{ кеВ}$ .

4.39.  $\lambda = \frac{2\pi\eta c}{E_\kappa - E_L}$ ;  $\lambda_{\kappa\alpha 1} = 0.1815 \text{ А}$ ;  $\lambda_{\kappa\alpha 2} = 0.17999 \text{ А}$ ;  $\lambda_{\kappa\alpha 3} = 0.1750 \text{ А}$ . 4.40. а)

$\lambda_{K_\alpha}^{Al} = 843 \text{ нм}$ ,  $\lambda_{K_\alpha}^{Co} = 180 \text{ нм}$ ; б)  $\Delta E = 5 \text{ кеВ}$ . 4.41.  $U = 15 \text{ кВ}$ .

4.42.  $d = \ln \left( \frac{I/I_0}{\mu_{\text{мас}} \rho} \right) \approx 0.1453 \text{ мм}$ ;  $\mu = \mu_{\text{мас}} \rho = 2.54 \cdot 10^4 \text{ м}^{-1}$ ;

$\mu_a = \mu_{\text{мас}} \frac{A}{N_A} = 4.22 \cdot 10^{-25} \text{ м}^2$ . 4.43.  $\mu_{\text{мас}} = 14.5 \text{ кЗ}^{-1} \text{ м}^2$ ;  $\mu = 1150 \text{ м}^{-1}$ ;

$\mu_a = 1.345 \cdot 10^{-26} \text{ м}^2$ . 4.44.  $\frac{\Delta N}{N} = n^2 e^{-\frac{\eta\omega}{kT}} = 3 \cdot 10^{-17}$ , де  $\omega = R \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right)$  4.45.

$\tau = \frac{l}{v} \ln \eta = 1.3 \text{ мкс}$ . 4.46.  $\tau = \frac{\pi\eta\omega}{P} \frac{g}{g_0} e^{-\frac{\eta\omega}{kT}} = 65 \text{ нс}$ , де  $g$  і  $g_0$  - кратності виродження

резонансного і основного рівнів. 4.47.  $\frac{\Delta\lambda_{\text{дон}}}{\Delta\lambda_{\text{нр}}} = \frac{4\pi\tau v_{\text{ймов}}}{\lambda} \approx 10^3$ , де  $v_{\text{ймов}} = \left( \frac{2RT}{M} \right)^{1/2}$ .

4.49.  $I = \frac{\eta}{\Delta\omega} = 1.93 \cdot 10^{-47} \text{ кЗ} \cdot \text{м}^2$ ,  $d = 112 \text{ нм}$ . 4.50.  $\frac{dN}{dE} = \left( \frac{I}{2\eta^2 E} \right)^{1/2}$ , де  $I$  - момент інерції молекули. Для  $I = 10$  величина  $dN/dE = 1.0 \cdot 10^4$  рівнів/еВ.

4.51.  $\frac{N_{\text{кол}}}{N_{\text{обер}}} = \frac{I}{3} e^{-\frac{\eta(\omega-2B)}{kT}} = 3.1 \cdot 10^{-4}$ , де  $B = \frac{\eta}{2I}$ ,  $I$  - момент інерції молекули.

4.52.  $\lambda = \frac{\lambda_0}{1 \pm \frac{\omega\lambda_0}{2\pi c}} = 423 \text{ і } 387 \text{ нм}$ . 4.53. а) Два поздовжніх з частотою  $\omega_1$  і  $\omega_2$ , два

поперечних з частотою  $\omega_3$ ; б) Всього різних коливань сім: три поздовжніх ( $\omega_1$ ,  $\omega_2$ ,  $\omega_3$ ) і чотири поперечних ( $\omega_4$ ,  $\omega_5$ ) - по два на кожну частоту.

5.1.  $\rho = \frac{3m_p}{4\pi R_O^3} = 1.45 \cdot 10^{17} \text{ кЗ} \cdot \text{м}^{-3}$ ,

$\rho_N = \frac{3}{4\pi R_O^3} = 8.3 \cdot 10^{43} \text{ м}^{-3}$ ,  $\rho_q = \frac{3e}{4\pi R_O^3} = 7 \cdot 10^{24} \text{ Кл} \cdot \text{м}^{-3}$ .

5.2.  $1 ME = 1.00032 \text{ a.o.m.}$  5.3. а)  $1) E_n^{36} = 931.5 \{m_{21Ne} - m_{20Ne} - m_n\} = 6.77 \text{ MeB},$   
 2)  $E_\alpha^{36} = 7.34 \text{ MeB};$  б)  $E = 14.4 \text{ MeB}.$  5.5.  $\frac{E^{36}}{A} = 7.76 \frac{\text{MeB}}{\text{нуклон}}$  5.6.  $E_{36} = 6.73 \text{ MeB}.$   
 5.7.  $E^{36} = E_{16O}^{36} - E_{12C}^{36} - E_{4He}^{36} = 7.12 \text{ MeB}.$   
 5.8.  $E = 2 \frac{E_{4He}^{36}}{A} A_{4He} - \frac{E_{6Li}^{36}}{A} A_{6Li} - \frac{E_{2H}^{36}}{A} A_{2H} = 22.44 \text{ MeB}.$   
 5.10.  $\Delta E^{36} = 931.5 \{ (A - 2Z)(m_n - m_p) - \Delta m_n \} = 6.36 \text{ MeB};$   
 $\Delta U_K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{3}{5} \cdot \frac{2Ze^2}{R} = 6.1 \text{ MeB}.$  5.11.  $R = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{3}{5} \cdot \frac{2Ze^2}{\Delta E^{36}} = 3.93 \cdot 10^{-15} \text{ м}.$   
 5.13. а) якщо  $N_1 = N_2$ , то  $N = 2J+1$ ; б) якщо  $N_1 \neq N_2$ , то  $N = 2j+1$ ; 5.14.  $J=3/2.$   
 5.16.  $J = \frac{9}{2}, N = 6.$  5.17.  ${}^3H: N = 2j+1 = 2; \quad {}^6Li: N = 2j+1 = 2;$   
 ${}^9Be: N = 2j+1 = 1; \quad {}^{15}N: N = 2J+1 = 2; \quad {}^{35}Cl: N = 2J+1 = 4.$  5.18.  $J = \frac{7}{2}.$  5.19.  
 $N = 4.$   
 5.20.  ${}^7Li: n: 1s - 2, 1p_{3/2} - 2; p: 1s - 2, 1p_{3/2} - 1.$   
 ${}^{25}_{12}Mg: n: 1s - 2, 1p_{3/2} - 4; 1p_{1/2} - 2; 1d_{5/2} - 4; p: 1s - 2, 1p_{3/2} - 4, 1p_{1/2} - 2, 1d_{5/2} - 5.$   
 ${}^{13}_6C: n: 1s - 2, 1p_{3/2} - 4; p: 1s - 2; 1p_{3/2} - 4, 1p_{1/2} - 1.$  5.22. а) 1)  ${}^3H: J = 1/2, P = 1,$   
 2)  ${}^3He: J = 1/2, P = -1;$  б) 1)  ${}^{15}N: J = 1/2, P = -1, 2) {}^{15}O: J = 1/2, P = -1.$   
 5.23.  ${}^{17}O: J = 5/2, P = +1; {}^{29}Si: J = 1/2, P = +1, {}^{39}K: J = 3/2, P = +1;$   
 ${}^{45}Sc: J = 7/2, P = -1; {}^{63}Cu: J = 3/2, P = -1.$   
 6.1.  $P = 1 - e^{-\lambda t}.$  6.2. а): 1)  $\frac{N}{N_0} = e^{-\lambda t} = 0.78;$  2)  $\frac{N}{N_0} = 0.084.$   
 б): 1)  $\frac{\Delta N}{N_0} = 1 - e^{-\lambda t} = 6.8 \cdot 10^{-5};$  2)  $\frac{\Delta N}{N_0} = 0.31.$  6.3.  $a = \frac{m}{\mu} N_A \lambda e^{-\lambda t} = 1.35 \cdot 10^{11} \text{ Бк}.$   
 6.4.  $\lambda = \frac{\ln \frac{a_0}{a}}{t} = 8.1 \cdot 10^{-9} \text{ с}^{-1}, \tau = \frac{t}{\ln \frac{a_0}{a}} \approx 4 \text{ роки}, \quad T_{\frac{1}{2}} \approx \frac{t \ln 2}{\ln \frac{a_0}{a}} \approx 2.8 \text{ року}.$   
 6.6.  $m = m_U \frac{\mu_{Pb}}{\mu_U} (1 - e^{-\lambda t}) = 0.3 \text{ кг}.$  6.8.  $T_8 = 4.51 \cdot 10^9 \text{ років}, T_5 = 0.713 \cdot 10^9 \text{ років}.$   
 6.9.  $T_4 = T_8 \frac{N_4}{N_8} = 2.48 \cdot 10^5 \text{ років}.$  6.10.  $\lambda = \frac{\Delta N \mu}{N_A m \Delta t} = 4.8 \cdot 10^{-18} \text{ с}^{-1}.$   
 6.13.  $N_2 = N_1(0) \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}), t_{max} = \frac{\ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}}{\lambda_1 - \lambda_2}, \quad \frac{N_1}{N_2} = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_1} = const.$   
 6.14.  $T_1 = T_2 \frac{N_1(0)}{N_2(t)} \approx 4.5 \cdot 10^9 \text{ років}.$  6.15. а)  $\frac{N_3}{N_1(0)} = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} = 0.027;$

$$6) \frac{a}{a_0} = e^{-\lambda_1 t} + \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) = 0.256. \quad 6.16. \quad \text{a)} Q = T_\alpha (1 + \frac{m}{M}) \approx 8.5 \text{ MeB};$$

$$6) \quad \frac{T}{Q} = \frac{m}{m+M} = 1.9\%; \quad \text{b)} v = \frac{\sqrt{2mT_\alpha}}{M} = 3.8 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

$$6.17. \quad Q = T_\alpha (1 + \frac{m}{M}) \frac{\ln 2}{T_1} \frac{m}{\mu} N_A \Delta t \approx 109 \text{ Дж} \cdot \text{сод}^{-1}.$$

$$6.18. \text{ a)} Q = T_\alpha \frac{m}{\mu} N_a (1 + \frac{m}{M}) (1 - e^{-\lambda t}) = 15.8 \text{ МДД}; \quad \text{б)}$$

$$a = \frac{\lambda Q}{T_\alpha (1 + \frac{m}{M}) (1 - e^{-\lambda t})} \approx 3 \cdot 10^7 \text{ Бк}.$$

$$6.20. \quad E_1 = 0; \quad E_2 = 0.10 \text{ MeB}; \quad E_3 = 0.23 \text{ MeB}; \quad E_4 = 0.30 \text{ MeB}.$$

$$6.21. \quad E_1 = 0; \quad E_2 = 0.728 \text{ MeB}; \quad E_3 = 1.673 \text{ MeB}; \quad E_4 = 1.793 \text{ MeB}.$$

$$6.22. \quad T_1 = 931.5 (m_n - m_p - m_e) = 0.78 \text{ MeB}.$$

$$6.23. \text{ a)} m_{6\text{He}} = m_{6\text{Li}} + \frac{Q}{931.5} = 6.0189 \text{ а.о.м.};$$

$$\text{б)} \quad m_{22\text{Na}} = 21.9964 \text{ а.о.м.} \quad 6.24. \quad T_\beta = \frac{T_0(T_0 + 2m_e c^2)}{2Mc^2} \cong 78.3 \text{ eB}. \quad 6.25. \quad E_0^- = M_i - M_f;$$

$$E_0^+ = M_i - M_f - 2m_e; \quad E_0^k = M_i - M_f. \quad 6.26.$$

$$P_\beta = \frac{(T_0 + 2m_e c^2)^{1/2}}{c} = 0.5 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \cdot \text{м} \cdot \text{с}^{-1}.$$

$$6.27. \quad E_\gamma = 931.5 (m_{28\text{Al}} - m_{28\text{Si}}) - E_\beta^{\text{Al}} = 1.78 \text{ MeB}. \quad 6.30. \quad \Delta E = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2} \approx 2.6 \cdot 10^{-3} \text{ eB}.$$

$$6.31. \quad v = \frac{E_\gamma}{Mc} = 2.2 \cdot 10^5 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}. \quad 6.32. \quad \tau = \frac{\eta c}{2Ev} \approx 7 \cdot 10^{-11} \text{ с}. \quad 6.33.$$

$$v = \frac{\Gamma}{6E} c = 1.8 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}.$$

$$7.1. \quad T_{\min} = -Q \frac{m_A + m_a}{m_A}. \quad 7.2. \quad E_A = T_0 \frac{m_a m_A}{(m_A + m_a)^2} \sin^2 \theta = 0.72 \text{ MeB}. \quad 7.3. \quad {}^1_1\text{H}.$$

$$7.5. \quad E_1^L = \frac{(m_A - m_a)^2}{(m_A + m_a)^2} T_0 = 0.1 \text{ MeB}. \quad 7.6. \quad \text{tg} \theta_n = \frac{m_A \sin 2\theta_1}{m_a - m_A \cos 2\theta_1} = 1.1547, \quad \theta_1 = 49^\circ.$$

$$7.7. \quad Q = 931.5 \{m_{10\text{B}} + m_{1\text{H}} - m_{7\text{Li}} - m_{4\text{He}}\} \approx 2.8 \text{ MeB};$$

$$T_{7\text{Li}} = Q \frac{m_{\text{He}}}{m_{\text{He}} + m_{\text{Li}}} \approx 1.02 \text{ MeB}; \quad T_{\text{He}} = Q \frac{m_{\text{Li}}}{m_{\text{He}} + m_{\text{Li}}} \approx 1.78 \text{ MeB}.$$

$$7.9. \text{ a)} Q = 931.5 \{m_{3\text{H}} + m_p - m_{4\text{He}}\} \approx -19.8 \text{ MeB};$$

$$\text{б)} Q = 931.5 \{m_N + m_{\text{He}} - m_D - m_0\} \approx -3.11 \text{ MeB};$$

$$\text{в)} Q = 931.5 \{m_C + m_{\text{He}} - m_D - m_N\} \approx -13.57 \text{ MeB};$$

$$\text{г)} Q = 931.5 \{m_{\text{Li}} + m_D - m_n - m_{3\text{He}}\} \approx 1.8 \text{ MeB}$$

$$7.10. \quad v = \left( \frac{E_1 + 931.5(2m_{He} - m_{Li})}{mc^2} \right)^{1/2} c \approx 2.1 \cdot 10^7 \text{ м с}^{-1}.$$

$$7.11. \quad Q = \frac{(m_N + m_n - m_C - m_D)(m_C + m_D)}{m_C} = 0.34 \text{ MeB}. \quad 7.13. \text{ а) } T_n = 4.4 \text{ MeB};$$

$$\text{б) } T_n = 18.1 \text{ MeB}; \text{ в) } T_n = 6.2 \text{ MeB}; \text{ г) } T_n = 1.9 \text{ MeB}. \quad 7.14. \text{ а) } T_{nop} = 1.1 \text{ MeB}; \text{ б) } T_{nop} = 3.2 \text{ MeB}.$$

$$7.15. \quad T_{Be} = \frac{m_p m_{Be}}{m_{Li}(m_p + m_{Li})} |Q| = 0.21 \text{ MeB}; \quad T_0 = 1.41 \text{ MeB}.$$

$$7.17. \quad T_n'' = \frac{m + M}{M} (E_{36}^{(ii)} - E_{36}) = 0.425 \text{ MeB}; \quad T_n^5 = 0.99 \text{ MeB}; \quad T_n^6 = 1.30 \text{ MeB}.$$

$$E_{36}^{(3)} = 17.50; \quad E_{36}^{(4)} = 17.72 \text{ MeB}; \quad 7.18.$$

$$E_{36}^{(1)} = E_{36} + \frac{m_C}{m_C + m_D}; \quad T_D = 16.67 \text{ MeB}; \quad T_{36}^{(2)} = 16.44 \text{ MeB}$$

$$T_D = 16.67 \text{ MeB}; \quad T_{36}^{(2)} = 16.44 \text{ MeB}. \quad 7.19. \quad \sigma_{ab} = \sigma_{nc} \frac{\Gamma_B}{\Gamma}. \quad 7.20. \quad \sigma_2 = \sigma_1 \frac{w_2}{w_1} = 0.1 \text{ барн}.$$

$$7.21. \quad \sigma = \frac{w\mu}{\rho d N_A} \approx 0.05 \text{ барн}. \quad 7.22. \quad \sigma = \frac{\Delta N k T}{n \tau p d} \approx 2.7 \text{ барн}. \quad 7.23. \quad \xi = 1 - \frac{(A-1)^2}{2A} \ln \frac{A+1}{A-1}.$$

$$7.24. \quad n = \frac{\left( \ln \frac{E_1}{E_n} \right)}{\left( \ln \frac{E_1}{E_n} \right)_{cp}}; \quad n_c \approx 115; \quad n_H \approx 18; \quad n_{Be} \approx 87.$$

$$7.25. \quad \Delta E_{cep} = \frac{2E_0 A}{(1+A)^2}; \quad (\Delta E)_{cep} = \frac{4E_0 A}{(1+A)^2}. \quad 8.1. \quad \text{Відповідно } 0.05, 0.4 \text{ і } 9 \text{ GeB}.$$

$$8.2. \quad \langle l \rangle = c \tau_0 (\eta(\eta+2))^{1/2} = 15 \text{ м}. \quad 8.3. \quad \frac{J}{J_0} = \exp \left( - \frac{l m c}{\tau_0 (T(T+2mc^2))^{1/2}} \right) = 0.22, \text{ де } m -$$

маса спокою  $\pi$  - мезона.

$$8.5. \quad T_\pi = m_\pi c^2 \left[ \csc \left( \frac{\theta}{2} \right) - 1 \right], \quad E_\gamma = \frac{m_\pi c^2}{2 \sin \left( \frac{\theta}{2} \right)}. \quad \text{При } \theta = 60^\circ \text{ енергія } T_\pi = E_\gamma = m_\pi c^2.$$

$$8.7. \text{ а) } T_{nop} = 4m_e c^2 = 2.04 \text{ MeB}; \text{ б) } T_{nop} = \frac{2m_\pi}{1 + \frac{m_\pi}{m_p}} c^2 = 320 \text{ MeB}. \quad 8.8. \quad \text{Заборонені } 1, 2 \text{ і } 3.$$

$$8.9. \quad \text{Заборонені } 2, 4 \text{ і } 5.$$

Таблиця 1. Робота виходу електрона з металів

Метал	$A, eV$	Метал	$A, eV$	Метал	$A, eV$
Алюміній	3.74	Калій	2.15	Нікель	4.84
Барій	2.29	Кобальт	4.25	Платина	5.29
Вісмут	4.62	Літій	2.39	Срібло	4.28
Вольфрам	4.50	Мідь	4.47	Титан	3.92
Залізо	4.36	Молібден	4.27	Цезій	1.89
Золото	4.58	Натрій	2.27	Цинк	3.74

Таблиця 2. Краї  $K$ - і  $L$ - смуг поглинання рентгенівського випромінювання

$Z$	Елемент	Краї смуги поглинання $\lambda, nm$			
		$K$	$L_I$	$L_{II}$	$L_{III}$
23	Ванадій	226.8	–	2390	2410
26	Залізо	174.1	–	1710	1740
27	Кобальт	160.4	–	1546	1580
28	Нікель	148.6	–	1411	1440
29	Мідь	138.0	–	1297	1326
30	Цинк	128.4	–	1185	1210
42	Молібден	61.9	430.5	471.5	491
47	Срібло	48.60	323.6	351.0	369.5
50	Олово	42.39	277.3	298.0	315.3
74	Вольфрам	17.85	102.22	107.3	121.5
78	Платина	15.85	88.8	93.2	107.2
79	Золото	15.35	86.1	90.5	103.8
82	Свинець	14.05	78.1	81.4	95.0
92	Уран	10.75	56.8	59.1	75.2

Таблиця 3. Константи двоатомних молекул

Молекула	Основний терм	Між- ядерна відстань $d, \text{нм}$	Частота коливань $\omega, 10^{14} \text{с}^{-1}$	Ангармо- нічність $x, 10^{-3}$	Енергія дисоціації $D, \text{eV}$
H <sub>2</sub>	<sup>1</sup> Σ	74.1	8.279	28.5	4.48
N <sub>2</sub>	<sup>1</sup> Σ	109.4	4.445	6.15	7.37
O <sub>2</sub>	<sup>3</sup> Σ	120.7	2.977	7.65	5.08
F <sub>2</sub>	<sup>1</sup> Π	128.2	2.147	8.51	~1.6
P <sub>2</sub>	<sup>1</sup> Σ	189.4	1.470	3.59	5.03
S <sub>2</sub>	<sup>3</sup> Σ	188.9	1.367	3.93	~4.4
Cl <sub>2</sub>	<sup>1</sup> Σ	198.8	1.064	7.09	2.48
Br <sub>2</sub>	<sup>1</sup> Σ	228.3	0.609	3.31	1.97
I <sub>2</sub>	<sup>1</sup> Σ	266.6	0.404	2.84	1.54
HF	<sup>1</sup> Σ	91.7	7.796	21.8	5.8
HCl	<sup>1</sup> Σ	127.5	5.632	17.4	4.43
HBr	<sup>1</sup> Σ	141.3	4.991	17.1	3.75
HI	<sup>1</sup> Σ	160.4	4.350	17.2	3.06
CO	<sup>1</sup> Σ	112.8	4.088	6.22	~9.7
NO	<sup>2</sup> Π	115.0	3.590	7.55	5.29
OH	<sup>2</sup> Π	97.1	7.036	22.2	4.35

Таблиця 4. Найважливіші властивості нуклідів

Z	Нуклід	Спін	Надлишок маси нукліда $M - A$ , а.о.м.	Масовий вміст у природній суміші, %	Тип розпаду	Період напів розпаду $T$	Енергія – $\alpha$ - і $\beta$ - частинок ( $K_{\beta\max}$ ) MeV
<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>	<b>8</b>
	n	1/2	0.008665	–	$\beta^-$	11.7хв	0.78
1	H	1/2	0.007825	99.985			
	$^2\text{H}$	1	0.014102	0.015			
	$^3\text{H}$	1/2	0.016049	–	$\beta^-$	12.3 роки	0.018
2	$^3\text{He}$	1/2	0.016030	$3 \cdot 10^{-4}$			
	$^4\text{He}$	0	0.002604	100			
3	$^6\text{Li}$	1	0.015126	7.52			
	$^7\text{Li}$	3/2	0.016005	92.48			
4	$^7\text{Be}$	3/2	0.016931	–	K	53 доби	
	$^8\text{Be}$	0	0.005308	–	$2\alpha$	$10^{-16}$ с	0.039
	$^9\text{Be}$	3/2	0.012186	100			
	$^{10}\text{Be}$	0	0.013535	–	$\beta^-$	$2.5 \cdot 10^6$ років	0.555
5	$^{10}\text{B}$	3	0.012939	20			
	$^{11}\text{B}$	3/2	0.009305	80			
6	$^{11}\text{C}$	3/2	0.011431	–	$\beta^+$	20.4 хв	0.97
	$^{12}\text{C}$	0	0	98.89			
	$^{13}\text{C}$	1/2	0.003354	1.11			
	$^{14}\text{C}$	0	0.003242	–	$\beta^-$	5570 років	0.155
7	$^{13}\text{N}$	–	0.005739	–	$\beta^+$	10 хв	1.2
	$^{14}\text{N}$	1	0.003074	99.63			
	$^{15}\text{N}$	1/2	0.000108	0.37			
8	$^{15}\text{O}$	–	0.003072	–	$\beta^+$	2.1 хв	1.68
	$^{16}\text{O}$	0	-0.005085	99.76			
	$^{17}\text{O}$	5/2	-0.000867	0.037			
	$^{18}\text{O}$	0	-0.000840	0.204			
9	$^{18}\text{F}$	–	0.000950	–	$\beta^+$	1.87 год	0.649
	$^{19}\text{F}$	1/2	-0.001595	100			



1	2	3	4	5	6	7	8
	$^{20}\text{F}$	—	-0.000015	—	$\beta^-$	12 с	5.42
10	$^{20}\text{Ne}$	0	-0.007560	90.92			
	$^{21}\text{Ne}$	—	-0.006151	0.26			
	$^{22}\text{Ne}$	0	-0.008616	8.82			
11	$^{22}\text{Na}$	3	-0.005565	—	$\beta^+$	2.6 року	0.540
	$^{23}\text{Na}$	3/2	-0.010227	100			
	$^{24}\text{Na}$	4	-0.009033	—	$\beta^-$	15 год	1.39
12	$^{23}\text{Mg}$	—	-0.005865	—	$\beta^+$	11 с	2.95
	$^{24}\text{Mg}$	0	-0.014956	78.60			
	$^{25}\text{Mg}$	5/2	-0.014160	10.11			
	$^{26}\text{Mg}$	0	-0.017409	11.29			
	$^{27}\text{Mg}$	1/2	-0.015655	—	$\beta^-$	9.5 хв	1.57 i 1.59
13	$^{26}\text{Al}$	—	-0.013100	—	$\beta^+$	6.7 с	3.20
	$^{27}\text{Al}$	5/2	-0.018465	100			
	$^{28}\text{Al}$	3	-0.018092	—	$\beta^-$	2.3 хв	2.86
14	$^{28}\text{Si}$	0	-0.023073	92.27			
	$^{29}\text{Si}$	1/2	-0.023509	4.68			
	$^{30}\text{Si}$	0	-0.0026239	3.05			
	$^{31}\text{Si}$	—	-0.024651	—	$\beta^-$	2.65 Г	1.47
15	$^{30}\text{P}$	—	-0.021680	—	$\beta^+$	2.5 хв	3.24
	$^{31}\text{P}$	1/2	-0.026237	100			
	$^{32}\text{P}$	—	-0.026092	—	$\beta^-$	14.3 доби	1.71
16	$^{32}\text{S}$	0	-0.027926	95.02			
	$^{33}\text{S}$	3/2	-0.028540	0.75			
	$^{34}\text{S}$	0	-0.032136	4.21			
	$^{35}\text{S}$	3/2	-0.030966	—	$\beta^-$	87 діб	0.167
17	$^{35}\text{Cl}$	3/2	-0.031146	75.4			
	$^{36}\text{Cl}$	2	-0.031688	—	$\beta^-.K$	$3.1 \cdot 10^5$ років	0.714
	$^{37}\text{Cl}$	3/2	-0.034104	24.6			
18	$^{36}\text{Ar}$	0	-0.032452	0.34			
	$^{37}\text{Ar}$	3/2	-0.033228	—	K	32 доби	
	$^{39}\text{Ar}$	—	-0.035679	—	$\beta^-$	265 років	0.565
	$^{40}\text{Ar}$	0	-0.037616	99.60			

1	2	3	4	5	6	7	8
19	<sup>39</sup> K	3/2	-0.036286	93.08			
	<sup>42</sup> K	2	-0.037583	–	$\beta^-$	1.52 г	3.55 і 1.99
24	<sup>51</sup> Cr	7/2	-0.055214	–	K	28 діб	
25	<sup>55</sup> Mn	5/2	-0.061946	100			
27	<sup>58</sup> Co	2	-0.064246	–	K. $\beta^+$	72 доби	0.47
	<sup>59</sup> Co	7/2	-0.066811	100			
	<sup>60</sup> Co	4	-0.066194	–	$\beta^-$	5.2 роки	0.31
29	<sup>63</sup> Cu	3/2	-0.070406	69.1			
	<sup>65</sup> Cu	3/2	-0.072214	30.9			
30	<sup>65</sup> Zn	5/2	-0.070766	–	K. $\beta^+$	245 діб	0.325
35	<sup>82</sup> Br	6	-0.083198	–	$\beta^-$	36 г	0.456
38	<sup>88</sup> Sr	0	-0.09436	82.56			
	<sup>89</sup> Sr	5/2	-0.09257	–	$\beta^-$	51 доба	1.46
	<sup>90</sup> Sr	0	-0.09223	–	$\beta^-$	28 років	0.535
39	<sup>90</sup> Y	2	-0.09282	–	$\beta^-$	64 г	2.24
47	<sup>107</sup> Ag	1/2	-0.09303	51.35			
53	<sup>127</sup> I	5/2	-0.09565	100			
	<sup>128</sup> I	1	-0.09418	–	K. $\beta^-$	25 хв	2.12 і 1.67
79	<sup>197</sup> Au	3/2	-0.03345	100			
	<sup>198</sup> Au	2	-0.03176	–	$\beta^-$	2.7 діб	0.96
81	<sup>204</sup> Tl	–	-0.02611	–	$\beta^-$	4.1 рік	0.77
82	<sup>206</sup> Pb	0	-0.02554	23.6			
	<sup>207</sup> Pb	1/2	-0.02410	22.6			
	<sup>208</sup> Pb	0	-0.02336	52.3			
83	<sup>209</sup> Bi	9/2	-0.01958	100			
	<sup>210</sup> Bi	4	-0.01589	–	$\alpha$	2.6·10 <sup>6</sup> років	4.97
84	<sup>210</sup> Po	–	-0.01713	–	$\alpha$	138 діб	5.3
86	<sup>222</sup> Rn	–	0.01753	–	$\alpha$	3.8 доби	5.49
88	<sup>226</sup> Ra	0	0.02536	–	$\alpha$	1620 років	4.78 і 4.59
90	<sup>232</sup> Th	0	0.03821	100	$\alpha$	1.4·10 <sup>10</sup> років	4.00 і 3.98
	<sup>233</sup> Th	–	0.04143	–	$\beta^-$	22 хв	1.23

Таблиця 5. Основні фізичні сталі

Швидкість світла у вакуумі	$c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ м/с}$
Гравітаційна стала	$G = 6.67 \cdot 10^{-11} \text{ м}^3/(\text{кг} \cdot \text{с}^2)$
Стала Авогадро	$N_A = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$
Число Лошмідта	$n_0 = 2.69 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$
Універсальна газова стала	$\dot{R} = 8.314 \text{ Дж/(К} \cdot \text{моль)}$
Стала Больцмана	$k = \begin{cases} 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К} \\ 0.8617 \cdot 10^{-4} \text{ еВ/К} \end{cases}$
Елементарний заряд	$e = \begin{cases} 4.803 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЕ} \\ 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} \end{cases}$
Маса електрона	$m_e = \begin{cases} 0.911 \cdot 10^{-27} \text{ з} \\ 0.511 \text{ МеВ} \\ 5.486 \cdot 10^{-4} \text{ а.о.м.} \end{cases}$
Питомий заряд електрона	$e/m_e = \begin{cases} 5.27 \cdot 10^{17} \text{ СГСЕ} \\ 1.76 \cdot 10^{11} \text{ Кл/кг} \end{cases}$
Маса протона	$m_p = \begin{cases} 1.6726 \cdot 10^{-24} \text{ з} \\ 938.28 \text{ МеВ} \\ 1.007276 \text{ а.о.м.} \end{cases}$
Питомий заряд протона	$e/m_p = \begin{cases} 2.87 \cdot 10^{14} \text{ СГСЕ} \\ 0.959 \cdot 10^8 \text{ Кл/кг} \end{cases}$
Стала Стефана – Больцмана	$\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К}^4)$
Стала закону зміщення Віна	$b = 0.290 \text{ см} \cdot \text{К}$
Стала Планка	$\eta = \begin{cases} 1.0546 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \\ 0.6582 \cdot 10^{-15} \text{ еВ} \cdot \text{с} \end{cases}$
Стала Рідберга	$R = 2.067 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ $R' = R/2\pi c = 1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$
Перший Борівський радіус	$r_1 = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$
Енергія зв'язку електрона у атомі водню	$E = 13.56 \text{ еВ}$
Комптонівська довжина хвилі електрона	$\lambda_c = 2.426 \cdot 10^{-12} \text{ м}$
Класичний радіус електрона	$r_e = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ м}$
Стала тонкої структури	$\alpha = 1/137.036$
Магнетон Бора	$\mu_B = \begin{cases} 0.9274 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл} \\ 0.5788 \cdot 10^{-4} \text{ еВ/Гс} \end{cases}$
Ядерний магнетон	$\mu_{\text{я}} = \begin{cases} 5.051 \cdot 10^{-27} \text{ Дж/Тл} \\ 3.152 \cdot 10^{-8} \text{ еВ/Гс} \end{cases}$

Магнітний момент: електрона	$\mu_e = 1.00116 \mu_B$
протона	$\mu_p = 2.7928 \mu_y$
нейтрона	$\mu_n = - 1.913 \mu_y$
дейтрона	$\mu_d = 0.8574 \mu_y$
Гіромагнітний множник: електрона	$g_e = 2.0022$
протона	$g_p = 5.5855$
нейтрона	$g_n = - 3.8263$
дейтрона	$g_d = 0.8574$
Квант магнітного потоку	$\Phi_0 = \begin{cases} 2.068 \cdot 10^{-15} \text{ Вб} \\ 2.068 \cdot 10^{-7} \text{ МкС} \end{cases}$
Електрична стала	$\epsilon_0 = 0.885 \cdot 10^{-11} \text{ Ф/м}$ $1/4\pi \epsilon_0 = 9 \cdot 10^9 \text{ м/Ф}$
Магнітна стала	$\mu_0 = 1.257 \cdot 10^{-6} \text{ Гн/м}$ $\mu_0/4\pi = 10^{-7} \text{ Гн/м}$

PERIODI		ГРУПИ											
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII				
1	<b>H</b> 1,0079 Гідроген								<b>He</b> 4,0026 Гелій	2 Порядковий номер	Назва елемента систематична		
2	<b>Li</b> 6,941 Літій	<b>Be</b> 9,0122 Берилій	<b>B</b> 10,811 Бор	<b>C</b> 12,011 Карбон	<b>N</b> 14,007 Азот	<b>O</b> 15,999 Оксиген	<b>F</b> 18,998 Флуор	<b>Ne</b> 20,179 Неон	<b>Fe</b> 55,847 Залізо	10 [Ne]2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	26 [Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup> Ферум		
3	<b>Na</b> 22,990 Натрій	<b>Mg</b> 24,305 Магній	<b>Al</b> 26,982 Алюміній	<b>Si</b> 28,086 Кремній	<b>P</b> 30,974 Фосфор	<b>S</b> 32,066 Сульфур	<b>Cl</b> 35,453 Хлор	<b>Ar</b> 39,948 Аргон	<b>Co</b> 58,933 Кобальт	18 [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	28 [Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup> Нікель		
4	<b>K</b> 39,098 Калій	<b>Ca</b> 40,078 Кальцій	<b>Sc</b> 44,956 Скандій	<b>Ti</b> 47,88 Титан	<b>V</b> 50,942 Ванадій	<b>Cr</b> 51,996 Хром	<b>Mn</b> 54,938 Манган	<b>Fe</b> 55,847 Ферум	<b>Ni</b> 58,69 Нікель	36 [Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	28 [Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup> Нікель		
5	<b>Rb</b> 85,468 Рубідій	<b>Sr</b> 87,62 Стронцій	<b>Y</b> 88,906 Йтрій	<b>Zr</b> 91,224 Цирконій	<b>Nb</b> 92,906 Ніобій	<b>Mo</b> 95,94 Молибден	<b>Tc</b> 98 Технецій	<b>Ru</b> 101,07 Рутеній	<b>Rh</b> 102,91 Родій	44 [Kr]4d <sup>8</sup> 5s <sup>1</sup>	46 [Kr]4d <sup>9</sup> 5s <sup>1</sup> Паладій		
6	<b>Cs</b> 132,91 Цезій	<b>Ba</b> 137,33 Барій	<b>*La</b> 138,91 Лантан	<b>Hf</b> 178,49 Гафній	<b>Ta</b> 180,95 Тантал	<b>W</b> 183,85 Вольфрам	<b>Re</b> 186,21 Реній	<b>Os</b> 190,2 Осмій	<b>Ir</b> 192,22 Ірідій	76 [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	78 [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>8</sup> 6s <sup>2</sup> Платина		
7	<b>Fr</b> [223] Францій	<b>Ra</b> 226,02 Радій	<b>*Ac</b> [227] Актиній	<b>Pb</b> 207,2 Свинець	<b>Bi</b> 208,98 Висмут	<b>Po</b> [209] Полоній	<b>At</b> [210] Астат	<b>Rn</b> [222] Радон	<b>Mt</b> [268] Мітнерій	108 [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	110 [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup> Унуній		
Висі окисли	<b>R<sub>2</sub>O</b>	<b>RO</b>	<b>R<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	<b>RO<sub>2</sub></b>	<b>R<sub>2</sub>O<sub>5</sub></b>	<b>RO<sub>3</sub></b>	<b>R<sub>2</sub>O<sub>7</sub></b>	<b>RO<sub>4</sub></b>					
Легкі водневі сполуки				<b>RH<sub>4</sub></b>	<b>RH<sub>3</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>R</b>	<b>HR</b>						
58 140,12 <b>Ce</b> [Xe]4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Церій	59 140,91 <b>Pr</b> [Xe]4f <sup>2</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Празеодим	60 144,24 <b>Nd</b> [Xe]4f <sup>3</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Неодим	61 147 <b>Pm</b> [Xe]4f <sup>4</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Прометій	62 150,36 <b>Sm</b> [Xe]4f <sup>5</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Самарій	63 151,96 <b>Eu</b> [Xe]4f <sup>6</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Європій	64 157,25 <b>Gd</b> [Xe]4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Гадоліній	65 158,93 <b>Tb</b> [Xe]4f <sup>8</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Тербій	66 162,5 <b>Dy</b> [Xe]4f <sup>9</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Диспрій	67 164,93 <b>Ho</b> [Xe]4f <sup>10</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Гольмій	68 167,26 <b>Er</b> [Xe]4f <sup>11</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Ербій	69 168,93 <b>Tm</b> [Xe]4f <sup>12</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Тулій	70 173,04 <b>Yb</b> [Xe]4f <sup>13</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Іттербій	71 174,97 <b>Lu</b> [Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup> Лютецій
90 232,04 <b>Th</b> [Rn]5f <sup>1</sup> 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup> Торій	91 231 <b>Pa</b> [Rn]5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Протактиній	92 238,03 <b>U</b> [Rn]5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Уран	93 237 <b>Np</b> [Rn]5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Нептуній	94 244 <b>Pu</b> [Rn]5f <sup>6</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Плутоній	95 243 <b>Am</b> [Rn]5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Амерцій	96 247 <b>Cm</b> [Rn]5f <sup>7</sup> 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup> Курій	97 247 <b>Bk</b> [Rn]5f <sup>9</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Берклій	98 249 <b>Cf</b> [Rn]5f <sup>10</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Каліфорній	99 252 <b>Es</b> [Rn]5f <sup>11</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Ейнштейній	100 257 <b>Fm</b> [Rn]5f <sup>12</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Фермій	101 258 <b>Md</b> [Rn]5f <sup>13</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Менделєвій	102 259 <b>No</b> [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Нобелій	103 260 <b>Lr</b> [Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> Лоуренцій

*Чобанюк В.М., Салій Я.П.*

# Фізичний практикум

*Атомна фізика*

Івано-Франківськ  
1996 р.

*Міністерство освіти України  
Прикарпатський університет ім. Василя Стефаника  
кафедра фізики твердого тіла*

*Чобанюк В.М., Салій Я. П.*

# **Фізичний практикум**

*Атомна фізика*

*Для студентів спеціальності 01.04. "Фізика"*

Івано-Франківськ -1996 р.

ББК 22.38.

Фізичний практикум. Атомна фізика / Чобанюк В.М., Салій Я.П. - Івано-Франківськ .  
Прикарпатський університет. 1996.-34с.

Описані лабораторні роботи з атомної фізики, що стосуються вивчення методів дослідження атомних явищ та властивостей атома. Значну увагу звернуто на теоретичне обґрунтування експериментальних даних.

Для студентів фізичних спеціальностей університетів.  
Іл. 12. Бібліографія 14.

Рецензенти: Рувінський МА., д-р фіз.-мат. наук, проф. Яцура М.М., канд.  
фіз.-мат. наук, доц.

Затверджено Вченою Радою Прикарпатського університету  
ім. Василя Стефаника  
(Протокол № 3 від 29 жовтня 1996 р.)



## ЛАБОРАТОРНА РБОТА № 1

ТЕМА: Дослідження розсіювання  $\alpha$ -частинок в речовині  
(моделювання досліду Резерфорда на ЕОМ).

МЕТА: Перевірити формулу Резерфорда, визначити заряд ядра методом моделювання експерименту.

### ЛІТЕРАТУРА

1. Шпольский Э.В. Атомная физика. М., Наука, 1974.
2. Савельев И.В. Курс общей физики. Т.3. М., Наука, 1979. с. 49-54.

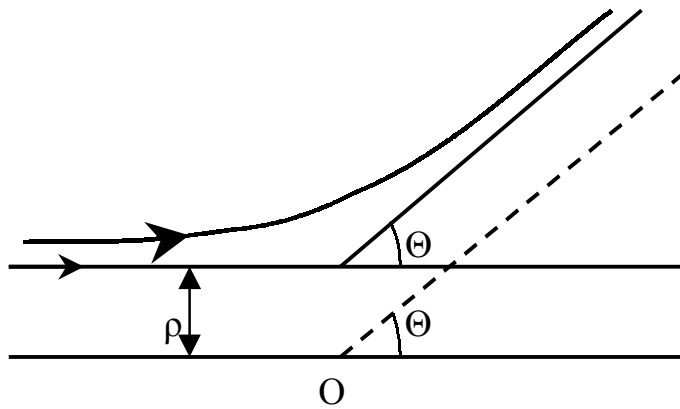
### ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ

1. Властивості  $\alpha$ -частинок.
2. Дослід Резерфорда.
3. Теорія розсіювання  $\alpha$ -частинок. Формула Резерфорда.
4. Визначення заряду ядра.

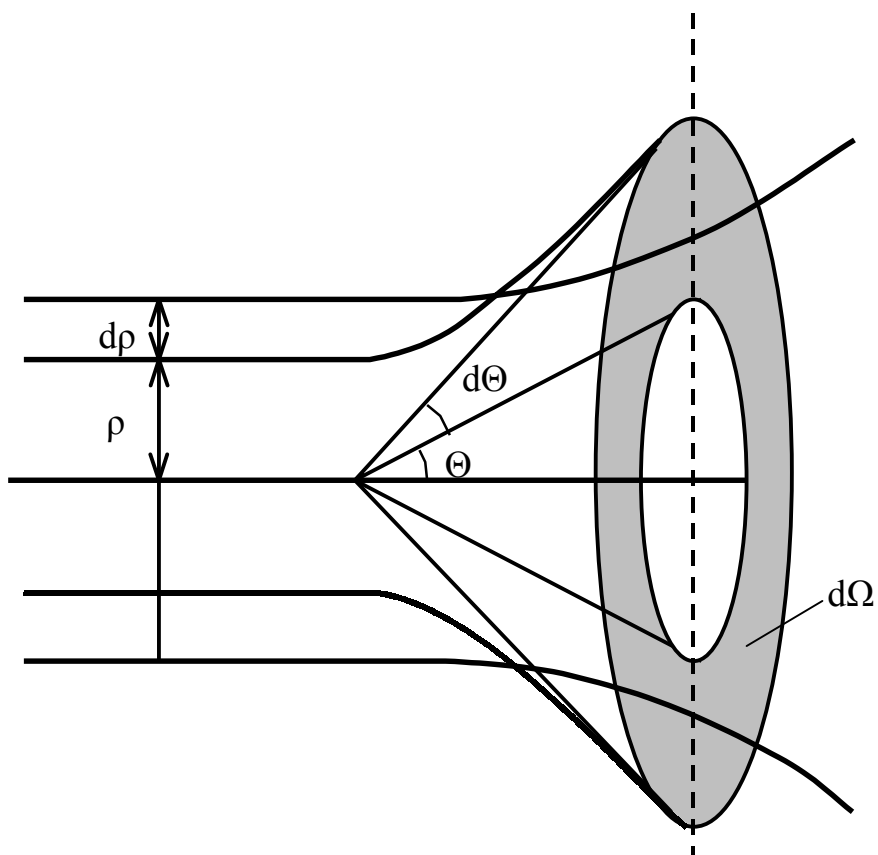
Одним з кращих засобів дослідження структури атома є зондування його швидкими частинками – електронами або  $\alpha$ -частинками.  $\alpha$ -частинки випромінюються багатьма радіоактивними речовинами. Вони відхиляються в електричному і магнітному полях, звідки випливає, що вони електрично заряджені. Напрямок відхилення показує, що вони заряджені позитивно. Проте поля, які викликають помітне відхилення електронів, не впливають на траєкторію  $\alpha$ -частинок, це означає, що вони мають більшу масу, ніж маса електронів. Досліди показали, що заряд, який переноситься  $\alpha$ -часткою, дорівнює  $+2e$ . На основі дослідів Резерфорда, а також дослідів з магнітним та електричним відхиленням було встановлено, що  $\alpha$ -частинки за своєю природою тождні з гелієм ( $\text{He}_2^4$ ).

Паралельний пучок  $\alpha$ -частинок, пройшовши крізь шар речовини, розсіюється,  $\alpha$ -частинки дещо змінюють свій напрям руху. Дослідження розсіювання тонкими металевими фольгами показали, що дуже часто спостерігається відхилення  $\alpha$ -частинок на невеликі кути, в середньому  $2^\circ$ – $3^\circ$ . Поруч з розсіюванням на малі кути співробітники Резерфорда Гейгер і Марсден виявили, що деяка кількість  $\alpha$ -частинок ( $\sim 1$  на 8000) розсіюється на дуже великі кути, що іноді перевищують  $90^\circ$  і досягаючи в деяких випадках  $180^\circ$ . Пояснити ці великі кути розсіювання накопиченням випадкових малих відхилень виявилось неможливим. Великі кути розсіювання спостерігаються як при проходженні  $\alpha$ -частинок крізь металеві фольги, так і в газах, і їх можна виявити на вільсонівських фотографіях, які показують, що великі кути відхилення утворюються не в результаті накопичення малих відхилень, а в результаті одного співудару.

Резерфорд вказав на те, що це можливо в тому випадку якщо в середині атома є дуже сильне електричне поле, яке утворюється позити-



Мал.1. Схема розсіювання  $\alpha$ -частинок на ядрі



Мал.2. Залежність кута розсіювання частинки від прицільного параметра

вним зарядом, зв'язаним з великою масою і сконцентрованим в дуже малому об'ємі (радіус порядку  $10^{-15}$  м). Звідси і виникла ядерна модель атома, згідно з якою атом побудований на зразок планетарної системи: мале за розміром, позитивно заряджене ядро, в якому зосереджена майже вся маса атома і негативні електрони, що обертаються навколо цього ядра по замкнених орбітах.

На підставі цих уявлень Резерфорд розвинув кількісну теорію розсіювання  $\alpha$ -частинок. Нехай в О (мал.1) міститься розсіююче ядро, заряд якого  $+Ze$ . Припустимо, що маса його настільки більша від маси  $\alpha$ -частинки, що при взаємодії з останньою ядро можна вважати за нерухоме. Припустимо, що сила взаємодії між ядром і  $\alpha$ -частинкою підлягає закону Кулона. Класична механіка показує, що при всіх цих припущеннях  $\alpha$ -частинка повинна описувати відносно ядра О гіперболу. Позначимо масу  $\alpha$ -частинки через  $M$ , її швидкість на великій віддалі від розсіюючого ядра – через  $v$ . Коли б  $\alpha$ -частинка не взаємодіяла з ядром, то вона пролетіла б на віддалі  $\rho$  (мал.1) від ядра (прицільна віддаль).

На основі закону збереження моменту імпульсу і енергії:

$$\rho = kctg(\varphi/2), \quad (1)$$

де  $\varphi$  – кут відхилення  $\alpha$ -частинки, а

$$k = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 Mv^2} \quad (1')$$

Оскільки прицільна віддаль  $\rho$  для окремих  $\alpha$ -частинок не доступна вимірюванню, то перевірити (1) на досліді безпосередньо неможливо. Проте можна покласти її в основу статистичної теорії, яка дасть нам вираз для ефективного перерізу розсіювання залежно від параметрів, доступних експериментальному визначенню.

Припустимо, що  $\alpha$ -частинки до розсіювання летять паралельним потоком. Для того, щоб відбулося розсіювання на кут, який лежить в межах від  $\varphi$  до  $\varphi + d\varphi$  частинка повинна пролетіти поблизу розсіюючого центру по траєкторії, прицільний параметр якої міститься в межах від  $\rho$  до  $\rho + d\rho$  (мал.2), причому як слідує із формули (1), прирости зв'язані співвідношенням:

$$d\rho = -\frac{k}{2\sin^2(\varphi/2)} d\varphi. \quad (2)$$

Знак мінус обумовлений тим, що із збільшенням  $\rho$  кут відхилення зменшується. Далі його не будемо враховувати, беручи до уваги абсолютне значення  $\rho$ . Тілесний кут, в межах якого знаходяться напрямки, що відповідають кутам розсіювання від  $\varphi$  до  $\varphi + d\varphi$  знайдемо як:

$$d\Omega = \frac{dS}{R^2} = 2\pi \sin\varphi d\varphi. \quad (3)$$

Якщо  $N$  – кількість частинок, що проходять у вихідному пучку через одиницю площі за одну секунду (густина потоку частинок), а  $dN$  – кількість частинок, що розсіяні в тілесному куті  $d\omega$ , то

$$dN = 2\pi\rho N d\rho.$$

Враховавши формулу (2) запишемо:

$$dN = 2\pi\rho N \frac{k}{2\sin^2(\varphi/2)} d\varphi$$

Підставимо сюди значення  $\rho$  із (1):

$$dN = 2\pi N \frac{k^2 \sin\varphi}{4\sin^4(\varphi/2)} d\varphi.$$

Останній вираз згідно (3) можна записати так:

$$dN = N \frac{k^2}{4\sin^4(\varphi/2)} d\Omega \quad (4)$$

Якщо ввести поняття ефективного перерізу розсіювання, то із співвідношення (4) отримаємо:

$$d\sigma = \frac{dN}{N} = \frac{k^2}{4\sin^4(\varphi/2)} d\Omega \quad (5)$$

Це і є формула Резерфорда. Величина  $k$  визначається згідно формули (1'), тому остаточно:

$$d\sigma = \left( \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 Mv^2} \right)^2 \frac{1}{4\sin^4(\varphi/2)} d\Omega \quad (6)$$

Формула Резерфорда дає змогу експериментально знайти заряд ядра  $Z$ . Справді, підраховуючи число  $\alpha$ -частинок, розсіяних на кут  $\varphi$ , ми будемо знати величину  $d\sigma$ . В праву ж частину формули Резерфорда входять, крім шуканої величини  $Z$ , або величини відомі або доступні експериментальному визначенню. Отже, для відшукування  $Z$  потрібно підрахувати число частинок  $N$  і  $dN$ . Із наведених співвідношень випливає, що коли змінювати кут  $\varphi$  і залишати сталими інші величини, то:

$$\frac{dN \sin^4(\varphi/2)}{\sin \varphi} = \text{const.} \quad (7)$$

Цю формулу і потрібно перевірити в даній роботі.

### ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Задати число  $\alpha$ -частинок, що попадають на розсіюючий центр ( $\sim 10000$ ).
2. Визначити число частинок при різних кутах відхилення.
3. Обчислити  $\sin^4(\varphi/2)$  і одержані результати занести в таблицю.
4. Перевірити виконання формули (7).
5. Побудувати графік залежності числа розсіяних  $\alpha$ -частинок від їх кута відхилення.
6. Обчислити похибку експерименту.
7. Провести обробку експериментальних даних за методом найменших квадратів з використанням лінійної, квадратичної та обернено пропорційної залежності.

## Лабораторна робота №2

### Вивчення ефекту Франка і Герца

**Мета:** Виявити дискретні рівні енергії атомів при допомозі досліду Франка і Герца,

**Прилади та обладнання:** Джерела постійної напруги, амперметр, мікроамперметр, вольтметр, потенціометри, трьохелектродна лампа, вимикачі.

#### Теоретичний вступ

Дослід Франка і Герца, проведений у 1913р, став яскравим експериментальним підтвердженням постулатів Бора про існування стаціонарних енергетичних станів атомів та випускання або поглинання атомом кванта випромінювання при переході з одного стаціонарного стану в інший.

Ідея досліду полягає у вимірюванні кількості енергії, яка передається атому під час його співударів з електронами,

Оскільки атоми володіють дискретними значеннями енергії, то удари між електронами і атомами можуть бути як пружні, так і непружні.

Удар називають пружним, якщо електрон не передає атому енергію, а лише змінює напрям своєї швидкості.

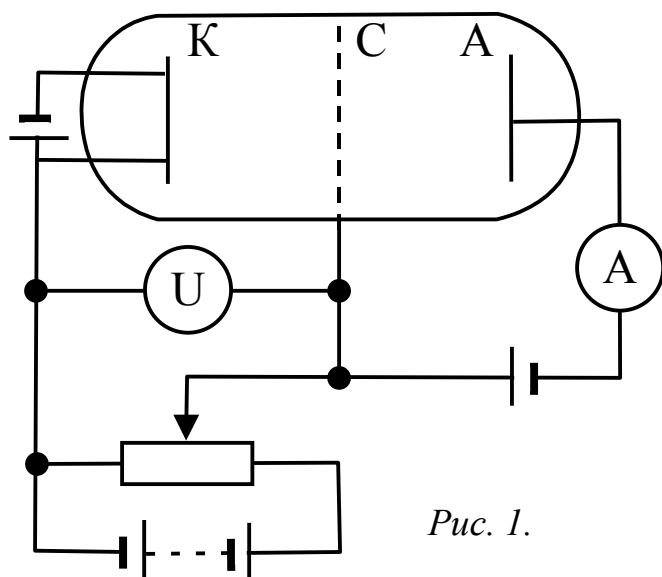
Непружним називають удар, в результаті якого за рахунок енергії електрона змінюється внутрішній стан атома, тобто електрон при зіткненні з атомом передає атому ту енергію, яка потрібна для переведу його в збуджений стан.

У досліді джерелом електронів є катод (К), а досліджуваною речовиною — пари ртуті при тиску 0,1 мм рт. ст. (рис. 1). Між сіткою і анодом створюється слабе затримуюче електричне поле (напругою близько

0,5В) і визначається залежність анодного струму (I) від напруги на сітці(U).

Добуту криву показано на рис.2. Першого максимуму сила струму досягає, при напрузі 4,9В. Потім величина струму різко спадає. Наступний максимум наступає при напрузі 9,8В і т. д. Пояснити таку залежність I від U можна тільки наявністю стаціонарних станів атома ртуті.

Якщо напруга менша 4,9В, то зіткнення електронів з ато-



мами пружні. Струм  $I$  зростає пропорційно напрузі  $U$ . Коли напруга підвищується до 4,9В, зіткнення електронів з атомами вже непружні. Внутрішня енергія атома збільшується стрибком, а електрон після зіткнення втрачає всю свою кінетичну енергію. Затримуюче поле не пропускає до анода повільні електрони, і величина струму різко зменшується.

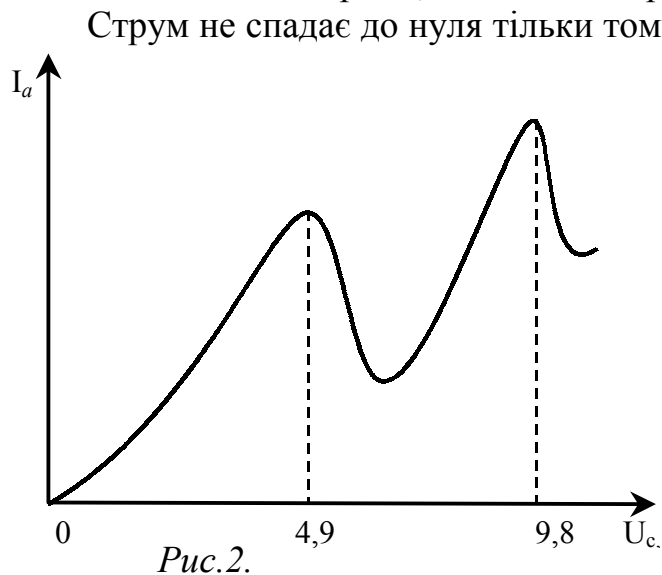


Рис.2.

Струм не спадає до нуля тільки тому, що якась частина електронів досягає сітки, не зазнавши непружних зіткнень. Другий максимум кривої, поданої на рис. 2, виникає тому, що при напрузі 9,8В електрони на шляху до сітки зазнають двох непружних зіткнень.

Потрібної для непружного зіткнення енергії електрон набуває тільки тоді, коли досягає сітки після проходження різниці потенціалів 4,9В. Звідси випливає, що внутрішня енергія атомів

ртуті не може змінюватися на величину, меншу  $\Delta W = 4,9\text{eV}$ . Отже, внутрішня енергія атома не може набути довільних значень і не може змінюватися на довільні значення. Це свідчить про те, що атом має дискретний набір стаціонарних станів. Правильність цього висновку підтверджується й тим, що при напрузі 4,9В пари ртуті починають випромінювати. Частота випромінювання, знайдена за формулою

$$\omega = \frac{\Delta W}{\hbar}, \quad (1)$$

$\hbar$  – стала Планка;  $\Delta W = eU$ ;  $U$  – критичний потенціал атома ртуті, збігається з експериментальним спостереженням. Це означає, що збуджені атоми ртуті переходять потім у нижчі енергетичні стани і випромінюють світлові кванти відповідно до другого постулату Бора,

Критичним потенціалом називають різницю потенціалів, пройшовши яку, електрон при зіткненні з атомом зазнає непружного удару, Критичний потенціал переходу атома з основного стану в перший збуджений стан називають першим або резонансним. Критичний потенціал переходу атома з основного стану в другий збуджений стан називають другим і т.д,

Аналогічні досліди були проведені із іншими газоподібними речовинами. Було встановлено, що в парі калію електрони втрачають енергію порціями в 1,63 eВ; в парі натрію — порціями в 2,12 eВ; в гелію – порціями в 21eВ.

### Опис методу і установки

Вивчення непружних ударів електронів з атомами інертних газів в даній лабораторній роботі проводять на установці принципова схема якої показана на рис. 3. Робочою лампою є радіолампа тиратрон ТГ-01/03, запов-

нений аргон, також використовують лампи для вимірювання вакууму ЛМ-2 або ПМИ-2, заповнені гелієм.

Для визначення резонансного потенціалу атома аргону і довжини хвилі фотона, випромінюваного ним, знімають вольт-амперну характеристику лампи  $I = f(U)$  при незмінній напрузі  $U_1$ .

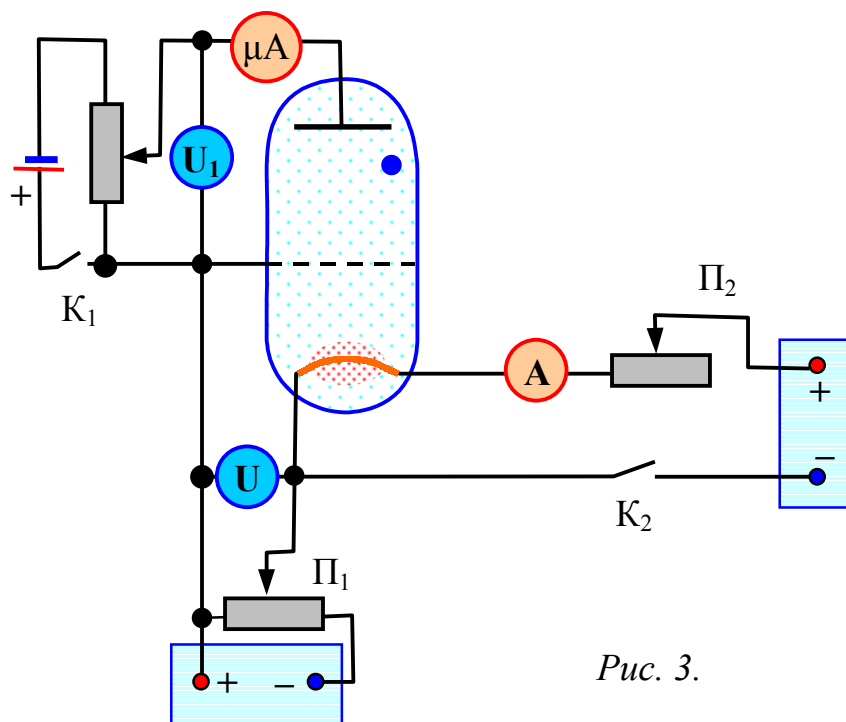


Рис. 3.

Підігрівання катода здійснюється за допомогою потенціометра  $\Pi_2$  на блоці живлення ІЭПП-1. Перед вмиканням ручки потенціометрів встановлюють в нульове положення. Величина струму в колі анода вимірюється мікроамперметром ( $\mu A$ ), а струм розжарення – амперметром (A). На анод відносно сітки подається невеликий від'ємний потенціал

( $U_1$ ), який створює слабе затримуюче електричне поле. На сітку відносно катода подається прискорюючий потенціал (U). Мікроамперметром ( $\mu A$ ) і вольтметром (U) реєструється зміна I від U.

При знятті вольт-амперної характеристики виникає ряд експериментальних труднощів. Падіння потенціалу вздовж нитки розжарення створює відмінність прискорюючих потенціалів між сіткою і різними точками нитки розжарення. В результаті отримується немоноенергетичний пучок електронів. Це, в основному, і впливає на форму кривої і на положення максимумів. Крім цього із усіх співударів при критичному потенціалі лише певна їх частка виявиться непружною. Цей фактор істотно впливає на глибину мінімуму. Спотворюючими факторами є також наявність об'ємних зарядів, можливе забруднення парами інших елементів відповідно з іншими потенціалами збудження, а також вторинні ефекти (фотоэффект від випромінювання збуджених атомів та ін.)

Також слід прийняти до уваги, що катод і анод в трубці з гарячим катодом завжди бувають зроблені із різних металів. Тому між катодом і анодом при відсутності зовнішньої напруги обов'язково є контактна різниця потенціалів, яка також належить до спотворюючих факторів.

Вмикання прискорюючої напруги U здійснюється тумблером "Сеть" на блоці живлення ВУП-2, а подається U на сітку лампи через потенціометри на блоці живлення і на панелі лампи (плавна зміна напруги).

Крива затримки залежності анодного струму  $I$  від затримуючого потенціалу  $U_1$  знімається при незмінній різниці потенціалів  $U$ . Добуту криву затримки, тобто криву розподілу електронів за енергіями (рис. 4), використовують для оцінки поперечного перерізу електронно-атомних зіткнень.

За графіком (рис. 4) визначають  $I$  та  $\Delta I$ , де  $I$  початковий струм, а  $I$  –

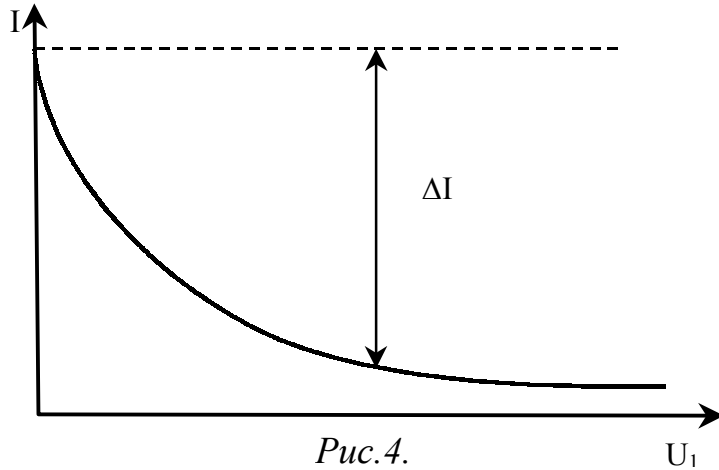


Рис. 4.

число електронів, які зазнали непружного удару з атомами в об'ємі  $V$  між сіткою і анодом:

$$V = Sd, \quad (2)$$

де  $S$  – площа сітки,  $d$  – відстань між сіткою і катодом.

Теорія удару [1] дає для  $\Delta I$  співвідношення:

$$\Delta I \approx eNn\nu\sigma V, \quad (3)$$

де  $e$  – заряд електрона,  $N$  – концентрація атомів газу,  $n$  – концентрація електронів,  $\nu$  – швидкість електрона;  $\sigma$  – поперечний переріз непружного удару електрона з атомом.

З деяким наближенням потік електронів можна оцінити так

$$n\nu = I / (S \cdot e). \quad (4)$$

Поперечний переріз непружного удару електрона з атомом, отриманий із співвідношень (2), (3), (4).

$$\sigma \approx \frac{\Delta I}{I} \cdot \frac{1}{Nd}. \quad (5)$$

Концентрацію атомів газу можна визначити з рівняння

$$N = \frac{P}{kT}, \quad (6)$$

де  $k$  – стала Больцмана,  $T$  – температура катода ( $\sim 2000$  К,  $P$  – тиск газу.

Тоді

$$\sigma = \frac{\Delta I}{I} \cdot \frac{kT}{Pd}. \quad (7)$$



## Порядок виконання роботи

1. Зібрати електричне коло у відповідності із схемою, зображеною на рис. 3.
2. Перед ввімкненням установки в мережу перевірити положення потенціометрів, ручки яких повинні знаходитись в крайньому лівому положенні. Ввімкнути джерела живлення.
3. Потенціометром на блоці живлення ІЭПП-1 встановити струм розжарювання 0,5 А (1,14 А). Струм розжарювання необхідно змінювати повільно, очікуючи встановлення стаціонарного режиму роботи катода.
4. Зніміть залежність  $I = f(U)$  при  $U_1 = \text{const}$  для значень  $U_1$  (1В, 2В, 3В), змінюючи  $U$  від 0 до 30В за допомогою ручки потенціометра  $\Pi_1$ .
5. Побудуйте графік залежності  $I = f(U)$  при  $U_1 = \text{const}$ . За графіком визначте значення резонансного потенціалу атома гелію.
6. Згідно з формулою (1) обчислити довжину хвилі фотона, що випромінюється атомом гелію.
7. При постійній напрузі на сітці  $U$  виміряти величини анодного струму  $I$ , змінюючи потенціометром затримуючу напругу. від 0 до 11В через 1В на джерелі живлення постійного струму Б5-50.
8. Побудувати графік залежності  $I = f(U_1)$  і визначити на ньому  $I$  та  $\Delta I$ .
9. Згідно з формулою (7) оцінити поперечний переріз електронно-атомних зіткнень.

## Контрольні запитання

1. Сформулюйте постулати Бора.
2. Що називається пружним і непружним ударом електрона з атомом?
3. Що підтверджує дослід Франка і Герца?
4. Чому мінімальне значення анодного струму не дорівнює нулю?
5. Як пояснюється світіння газів при електричному розряді?
6. Пояснити характер зміни вольт-амперної характеристики в досліді Франка з Герца.

## Література

1. Шпольський З.В. Атомна фізика. К., Вища школа. Т. 1, 1963,
2. Білий М.І. Атомна фізика. К., Вища школа, 1973.
3. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 5, Ч. 1. Атомная физика. М., Наука, 1986.
4. Загальна фізика. Лабораторний практикум. / Під ред. І.Т. Горбачука. К., Вища школа, 1992.
5. Лабораторные занятия по физике / Под ред. Л.Л. Гольдина. М., Наука, 1983,

## Лабораторна робота №3

### Експериментальна перевірка співвідношення невизначеностей

**Мета:** Перевірити справедливості співвідношення невизначеностей Гейзенберга для фотонів.

**Прилади та обладнання:** лазер ЛГН-109, щілина з мікрометричним гвинтом, екран, рулетка на 2 м, мікроскоп МБП-2.

#### Теоретичні відомості

На відміну від класичних об'єктів мікрочастинки і фотони у відповідних умовах проявляють або корпускулярні або хвильові властивості, тобто проявляють корпускулярно-хвильовий дуалізм. Математичним вираженням дуалізму є співвідношення невизначеності в імпульсі  $\Delta p_x$  та у координаті  $\Delta x$ , але не може бути меншим за  $\hbar = h/2\pi$ ;  $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$ .

Світлову (електромагнітну) хвилю у фотоелектричних явищах, люмінесценції, при дослідженні світлового тиску або хімічної дії можна представити потоком фотонів з енергією  $E = \hbar\omega$  та імпульсом  $p = \hbar k$ . Нехай на щілину шириною  $\Delta x$  падає потік світла. В результаті дифракції світло попадає в область геометричної тіні, що також визначає одержання фотоном додаткового імпульсу  $\Delta p$  у напрямі  $x$ , тобто  $\Delta p_x$  (рис. 1). До проходження щілини імпульс фотона був точно визначений, оскільки  $\Delta p_x = 0$ , а його місцезнаходження було зовсім не визначено (фотон точно десь є на  $\Delta x$ ).

З рис. 1 дістанемо  $\Delta p_x = p \sin\varphi$  або  $\Delta p_x = \hbar k \sin\varphi$ . Оскільки  $k = 2\pi/\lambda$ , то

$$\Delta p_x = \hbar \frac{\sin\varphi}{\lambda} \quad (1)$$

Нехай плоска монохроматична хвиля падає на щілину шириною  $\Delta x$ . Внаслідок дифракції на ній хвиля поширюється у всіх можливих напрямках у межах кута від 0 до  $\varphi$ .

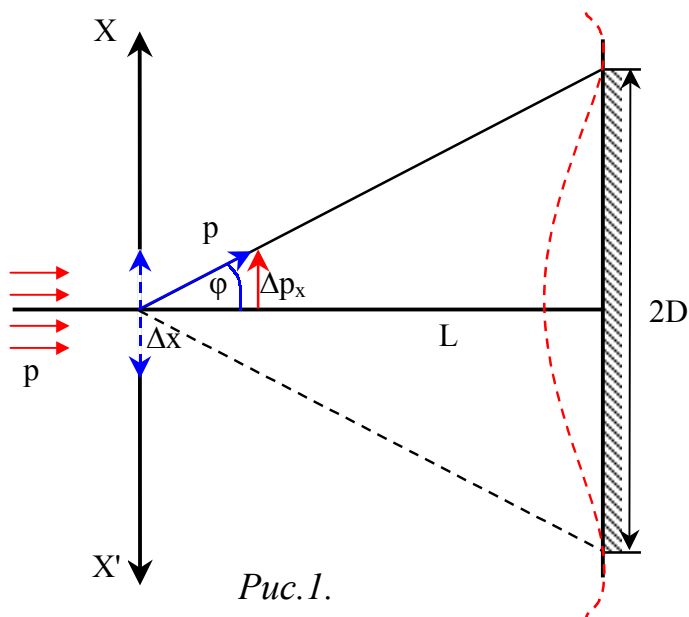


Рис. 1.

Більша частина енергії хвилі після проходження щілини припадає на спектр кутів  $0 < \varphi < \varphi_1$  де  $\varphi_1$  – кут, що відповідає напрямку на перший мінімум. Для цього мінімуму виконується умова інтерференції  $\Delta x \sin\varphi_1 = 2 \frac{\lambda}{2}$ . Цей вираз визначає умовну межу  $U_1 = 2\varphi_1$ ;  $U_2 = 2\varphi_2$ ; ...;  $U_{1n} = 2\varphi_n$  дифракційного спектра плоскої хвилі після проходження щілини. Враховуючи, що падаюча хвиля розсіюється як на більші ( $\varphi > \varphi_1$ ), так і

на менші ( $\varphi < \varphi_1$ ) кути, ніж  $\varphi_1$ , можна записати наступну хвильову умову невизначеностей

$$\Delta x \sin \varphi \leq \lambda. \quad (2)$$

Цій умові задовільняють хвилі будь-якої природи. Аналіз виразу показує, що зменшення  $\Delta x$  супроводиться розширенням сектора кутів, в якому зосереджене дифракційне поле. На рис. 2 показано розподіл інтенсивності для різних кутів у випадку двох щілин ( $\Delta x = a_1$ ) з шириною  $\Delta x = a$  (рис. 2, а) та  $2\Delta x = b$  (рис. 2, б). Бачимо, що інтервал значень  $\sin \varphi_1$  для щілини  $2\Delta x$  зменшиться вдвічі порівняно з щілиною  $\Delta x$ .

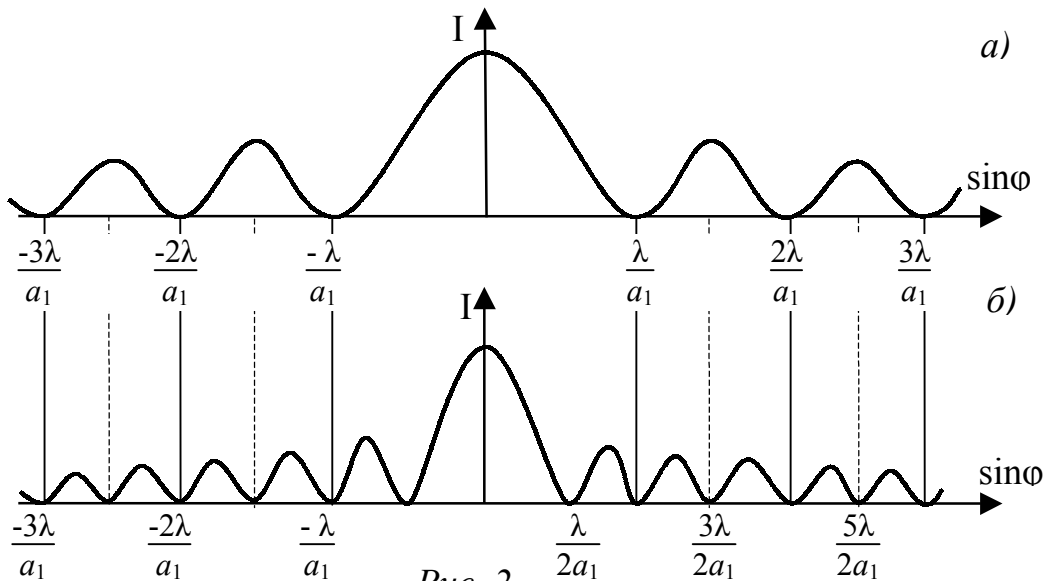


Рис. 2.

Порівнюючи ці два підходи до тлумачення картини на екрані, можна твердити, що мінімуму дифракції відповідає мінімум імовірності попадання фотонів в дане місце при сталих умовах спостереження.

Це також означає, що вирази (2) і (1) описують поведінку одного і того ж об'єкта. Виразимо в (2) кут дифракції  $\sin \varphi \leq \frac{\lambda}{\Delta x}$  і підставимо його у (1), маємо

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar. \quad (3)$$

В роботі експериментальне перевіряється вираз (3) для фотонів. При дослідженні вимірюється ширина щілини, яка характеризує невизначеність координати фотона  $\Delta x$ , а також ширина дифракційного максимуму, який характеризує невизначеність поперечного імпульсу фотона  $\Delta p_x$ . Джерелом світла у роботі є гелій-неоновий лазер. При користуванні лазером слід дотримуватись правил техніки безпеки, берегти очі від попадання прямого та відбитого випромінювання.

При освітленні лазерним променем каліброваної щілини на екрані можна дістати дифракційний спектр. Тепер вираз (3) можна записати так;

$$\Delta x D \geq \text{const}. \quad (4)$$

Цей вираз і буде робочою формулою дослідження співвідношення невизначеностей Гейзенберга.

## Порядок виконання роботи

1. Для перевірки показів мікрометричного гвинта щілини, користуючись мікроскопом МБП-2, здійснити його градуювання. Поверхню щілини освітлювати слабким боковим світлом. Побудувати градуювальну криву  $\Delta x = f(n)$ .

2. Розташувати на оптичній лаві лазер, щілину та екран. Віддаль між щілиною та екраном 1,5 – 2,0 м.

3. Змінювати отвір щілини від 0,05 до 0,4 мм через кожні 0,03-0,05 мм. Для кожного значення  $\Delta x$  виміряти ширину головного максимуму  $2D$ . Побудувати графік залежності  $D = f(\Delta x)$ .

4. Змінити віддаль між щілиною та екраном  $L$ . Переконайтесь, що для нових значень  $D$  добуток  $\Delta x D$  дорівнює добутку  $L\lambda$ , де  $\lambda = 6,33 \cdot 10^{-7}$  м (для лазера ЛГН-109).

## Контрольні запитання

1. У чому полягає фізичний зміст співвідношень невизначеностей Гейзенберга?
2. Де використовуються хвильові властивості потоків частинок?
3. Чому для виконання даної роботи доцільно використовувати лазер?
4. Наведіть приклади фізичних явищ, які знаходять своє пояснення на основі співвідношення невизначеності.

## Література

1. Белый М.И., Охрименко Б.А. Атомная физика. К., Высшая школа, 1984.
2. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 5. М., Наука, 1976.
3. Загальна фізика. Лабораторний практикум / Під редакцією І.Г. Горбачука. К., Вища школа, 1992.

## Лабораторна робота №4

### Вивчення монохроматора УМ-2

**Мета:** Вивчити будову та призначення монохроматора УМ-2 і проградувати його.

**Прилади і матеріали:** Монохроматор УМ-2, неонова лампа, блок живлення ЕПС-111.

### Теоретичні відомості

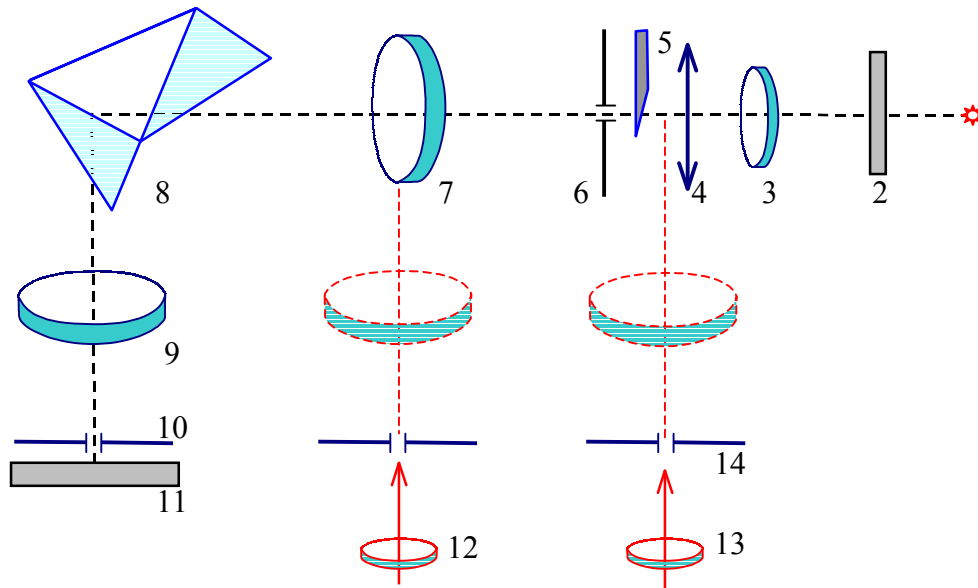
#### 1. Призначення

Універсальний монохроматор УМ-2 складається з монохроматора, набору кювет з тримачами і конденсорами та фотоелектричного пристрою.

Монохроматор УМ-2 призначений для різних спектральних досліджень і розв'язку ряду аналітичних задач. Із змінними насадками прилад може служити в якості спектроскопу. Набір кювет з тримачами і конденсорами призначений для абсорбційного аналізу. Фотоелектричний пристрій, який представляє собою фотоелемент з гальванометром, призначений для виміру інтенсивності спектральних ліній.

Монохроматор УМ-2 виділяє монохроматичні ділянки спектру в видимій і близькій інфрачервоній областях в діапазоні хвиль від 3800 до 10000 А.

#### 2. Оптична схема і принцип дії приладу



- 1 — джерело світла;
- 3 — конденсор;
- 5 — призма порівняння;
- 7 — об'єктив коліматора;
- 9 — об'єктив зорової труби;
- 11 — захисне скло;
- 13 — окуляр  $10^{\times}$ ;

- 2 — захисне скло кожуха лампи;
- 4 — лінза;
- 6 — вхідна щілина;
- 8 — диспергуюча призма;
- 10 — вихідна щілина;
- 12 — окуляр  $5^{\times}$ ;
- 14 — покажчик в фокальній площині зорової труби.

Світло через вхідну щілину падає на об'єктив коліматора і паралельним пучком проходить диспергуючу призму. Під кутом  $90^\circ$  до падаючого пучка світла розміщується вихідна труба монохроматора.

Повертаючи призмийний столик на різні кути відносно падаючого пучка світла, отримують в вихідній щілині світло різної довжини хвилі, яке проходить через призму в мінімумі відхилення.

### **3- Конструкція**

До складу приладу входять наступні основні частини:

1. Вхідна щілина з мікрометричним гвинтом, який дозволяє відкривати щілину на потрібну ширину. Звичайна робоча ширина щілини рівна 0,02-0,03 мм.

2. Коліматорний об'єктив з мікрометричним гвинтом. Гвинт дозволяє зміщувати об'єктив відносно щілини при фокусуванні спектральних ліній різних кольорів.

3. Складна спектральна призма, яка встановлена на поворотному столику. Призма складається з трьох склеєних призм  $P_1$ ,  $P_2$ , і  $P_3$ . Перші дві призми  $P_1$  і  $P_2$  з кутами заломлення  $30^\circ$  виготовлені з важкого флінту, який володіє великою дисперсією. Проміжна призма  $P_3$  зроблена з крону. Промені відбиваються від її гіпотенузової грані і повертаються на кут  $90^\circ$ . Завдяки цьому дисперсії призм  $P_1$  і  $P_2$  додаються.

4. Поворотний столик обертається навколо вертикальної осі за допомогою мікрометричного гвинта з відрахунковим барабаном. На барабан нанесена гвинтова доріжка з градусними поділками. Вздовж доріжки ковзає покажчик повороту барабану. При обертанні барабану призма повертається і в центрі поля зору з'являються різні ділянки спектру.

5. Зорова труба, яка складається з об'єктива і окуляра. Об'єктив дає зображення вхідної щілини в своїй фокальній площині. Зображення розглядається через окуляр.

6. Масивний корпус, який захищає прилад від пошкоджень і забруднень.

7. Оптична лава, на якій можуть переміщуватись рейтери з джерелом світла і конденсором, що служить для концентрації світла на вхідній щілині. Джерело світла рекомендують розміщувати на відстані 40-50 см від щілини, а конденсор — на відстані 13-15 см від джерела.

### **Хід роботи**

1. Ознайомитись з конструкцією монохроматора УМ-2.
2. Проградувати монохроматор по неоновій лампі. Для цього необхідно;
  - а) поставити на оптичну лаву конденсорну лінзу і неонову лампу;
  - б) поворотом барабана виставити ширину вхідної щілини 0,12 мм;
  - в) ввімкнути неонову лампу в сітку 220 В;
  - г) висуваючи окуляр зорової труби монохроматора домогтися чіткого (яскравого) зображення спектральних ліній;

д) спостерігаючи в окулярі спектр випромінювання неону, виставити поворотом барабана довжин хвиль кожну спектральну лінію навпроти візира в окулярі монохроматора і провести відлік їх розміщень по шкалі барабана довжин хвиль;

є) побудувати криву градування. Для цього потрібно по осі ординат відкласти довжини хвиль спектра неону, а по осі абсцис — поділки шкали барабана довжин хвиль монохроматора.

### **Контрольні запитання**

1. Для чого призначений монохроматор УМ-2?
2. В яких областях монохроматор УМ-2 виділяє монохроматичні ділянки спектру?
3. Оптична схема приладу.
4. Принцип дії приладу.
5. Основні частини приладу.

### **Література**

1. Белый М.И., Охрименко Б.А. Атомная физика. К., Высшая школа, 1984.
2. Кортнев А.В., Рублев Ю.В., Куценко А.М. Практикум по физике. М., Высшая школа, 1965.
3. Лабораторные занятия по физике / Под ред. Гольдина. М., Наука, 1983.
4. Інструкція з експлуатації приладу УМ-2.

## Лабораторна робота №5

### Вивчення спектру водню, визначення сталої Рідберга і сталої Планка

**Мета:** Вивчити спектр водню і за отриманими даними визначити сталу Рідберга і сталу Планка.

**Прилади і матеріали:** монохроматор УМ-2, прилад СПЕКТР-1 з спектральними трубками водню і гелію.

#### Теоретичні відомості

На основі експериментальних результатів розсіювання  $\alpha$ -частинок на металічній фользі Резерфордом була запропонована ядерна модель атома. Згідно з цією моделлю в ядрі атома зосереджений увесь його позитивний заряд і майже вся маса атома. Навколо ядра в області з розмірами  $10^{-10}$  м рухаються електрони.

Проте застосування класичної електродинаміки до ядерної моделі атома привело до повної суперечності з дослідними фактами.

Згідно з класичною теорією повинні мати місце:

а) неперервна втрата енергії електронами, що обертаються, у вигляді випромінювання електромагнітних хвиль і нестійкість атома;

б) існування тільки суцільного спектру випромінювання; відсутність спектральних ліній.

Насправді атом є стійкою системою і випромінює енергію тільки за певних умов; випромінює лінійчастий спектр; згідно з законом Кірхгофа спектри поглинання газу також мають лінійчасту структуру.

Досліджуючи спектр водню, швейцарський вчитель фізики Бальмер у 1885 р. встановив, що довжини хвиль відомих на той час дев'яти ліній спектра водню

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

де  $\lambda_0 = 3646,13$  А;  $n = 3, 4, 5, \dots, 11$  — цілі числа.

Цю формулу записують у вигляді серіальної формули Бальмера

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{r^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

де  $\nu$  — хвильове число;  $\nu = 1/\lambda$ ;  $R$  — стала Рідберга.

У 1908 р. Рітц встановив, що частоти спектральних ліній випромінювання будь-якого атома можуть бути зображені у вигляді різниці двох термів. Складаючи різні комбінації термів, можна знайти різні можливі частоти спектральних ліній цього атома.

Так, для водню були розраховані, а також експериментально виявлені:

а) у далекій ультрафіолетовій області спектру серія ліній, що дістала назву серії Лаймана, хвильові числа яких задовольняють співвідношенню



$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{l^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{де } n=2,3,4, \dots$$

б) в інфрачервоній області спектру водню була виявлена серія ліній Пашена, що задовільняють співвідношенню

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{де } n=4,5,6, \dots$$

в) в далекій інфрачервоній області — серія Брекета

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{де } n=5, 6, 7, \dots$$

серія Пфунда:

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{де } n=6, 7, 8, \dots$$

серія Хемфрі:

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{де } n=7, 8, 9, \dots$$

Усі серіальні формули спектру водню можуть бути виражені єдиною формулою;

$$\tilde{\nu} = R \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1)$$

де  $k$  і  $n$  — цілі числа (для кожної серії  $k$  — постійне, а  $n$  — набуває значення  $k+1, k+2, \dots$ ).

Перша спроба побудувати неklasичну теорію атома була зроблена Борм у 1913 р. і відіграла важливу роль у розвитку сучасної фізики.

В основі цієї теорії лежала ідея зв'язати в єдине ціле: емпіричні закономірності лінійчастих спектрів, ядерну модель атома Резерфорда й квантовий характер випромінювання і поглинання світла, що підтверджувались численними експериментальними результатами.

Проте для досягнення цієї мети Бору довелося класичний опис доповнити деякими обмеженнями. Ці обмеження були сформульовані у вигляді постулатів, фізичний зміст яких суперечив класичному руху електронів. Однак такий непослідовний шлях привів до правильних результатів у поясненні спектральних закономірностей атома водню, оскільки у борівській теорії були правильно зазначені деякі властивості атомних систем.

Ці правильні результати отримані в квантовій механіці з більш точних і загальних положень, що не вимагають постулатів.

Теорію Бора можна застосовувати й до воднеподібних систем, які складаються з ядра з зарядом  $+Ze$  і одного електрона ( $\text{He}^+, \text{Li}^{++}$ ).

Перший постулат Бора: існують деякі стаціонарні стани атома, перебуваючи в яких він не поглинає і не випромінює енергії.

Другий постулат Бора: в стаціонарному стані атома електрон, рухаючись по круговій орбіті, повинен мати квантоване значення моменту імпульсу, що задовільняє умові

$$L_n = mv_n r_n = n\hbar$$

де  $m$ ,  $v$ ,  $r$  — маса, швидкість і радіус орбіти електрона.  $\hbar$  — стала Планка,  $n=1, 2, 3, \dots$

Третій постулат Бора: при переході атома з одного стаціонарного стану в інший випромінюється або поглинається квант енергії. Випромінювання відбувається при переході в стан з меншою енергією (при переході електрона з орбіти більш віддаленої від ядра на орбіту, що знаходиться ближче до ядра.) Поглинання енергії зв'язане з переходом атома в стан з більшою енергією (переходом електрона на більш віддалену орбіту.)

Якщо  $W_n$  і  $W_k$  — енергії атома в двох стаціонарних станах, то

$$W_n - W_k = \hbar\omega \quad (2)$$

При  $W_n > W_k$  відбувається випромінювання кванта енергії  $\hbar\omega$ , при  $W_n < W_k$  — поглинання кванта.

На основі постулатів Бора виведемо серіальну формулу (1). Бор вважав, що рух електрона в атомі відбувається по круговій орбіті радіуса  $r$  під дією кулонівської сили притягання електрона до ядра, яка зрівноважується доцентровою силою, тому

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3)$$

Домноживши співвідношення на  $r^2$ , отримаємо

$$mv^2 r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (4)$$

Згідно з другим постулатом Бора.

$$mv_n r_n = n\hbar \quad (5)$$

Розв'язавши рівняння (4) і (5) відносно  $r$ , маємо

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Ze^2 m} \quad (6)$$

де  $n=1, 2, 3, \dots$  — номер орбіти по якій рухається електрон;  $r$  — її радіус. Для водню  $Z=1$ , тоді для  $n=1$

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.528 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

що є радіусом першої борівської орбіти електрона в атомі водню. З формули (6) випливає, що радіуси дозволених орбіт зростають пропорційно квадрату цілих чисел.

Енергія електрона в воднеподібній системі дорівнює сумі його кінетичної і потенціальної енергій в електричному полі ядра;

$$W = W_k + W_\pi = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

Підставивши в останній вираз  $mv^2$  з (3) і  $r$  з (6), одержимо вираз енергії електрона в атомі на  $n$ -й орбіті;

$$W_n = \frac{Z^2 m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (7)$$

У квантовій механіці вважають  $n$  номером дозволеного енергетичного рівня для електрона. Його називають головним квантовим числом. Головне квантове число дозволяє обчислити енергію стаціонарного стану. Підставивши у вираз (2) значення енергії з формули (7), отримаємо серіальну формулу (1)

$$\hbar\omega = W_n - W_k = \frac{Z^2 m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} + \frac{Z^2 m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{k^2}$$

або

$$\omega = \frac{m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3} Z^2 \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (8)$$

Так, для водню  $Z=1$  і, підставивши у (8)

$$R = \frac{m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3}$$

одержимо вираз, який повністю збігається з формулою (1).

Усі серії ліній випромінювання зручно зображати на діаграмі енергетичних рівнів стрілками, що зв'язують рівні, між якими відбуваються переходи електронів (рис. 1). Із всього спектру випромінювання атома водню можна спостерігати тільки частину ліній серії Бальмера у видимій області спектру.

Із серіальної формули (8) можна обчислити сталу Планка

$$\hbar^3 = \frac{m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \omega} Z^2 \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

виражаючи частоту через довжину хвилі

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

отримаємо робочу формулу для розрахунку  $\hbar$ :

$$\hbar = \sqrt[3]{\frac{m e^4 \lambda}{64 \pi^3 \epsilon_0^2 c} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)} \quad (9)$$

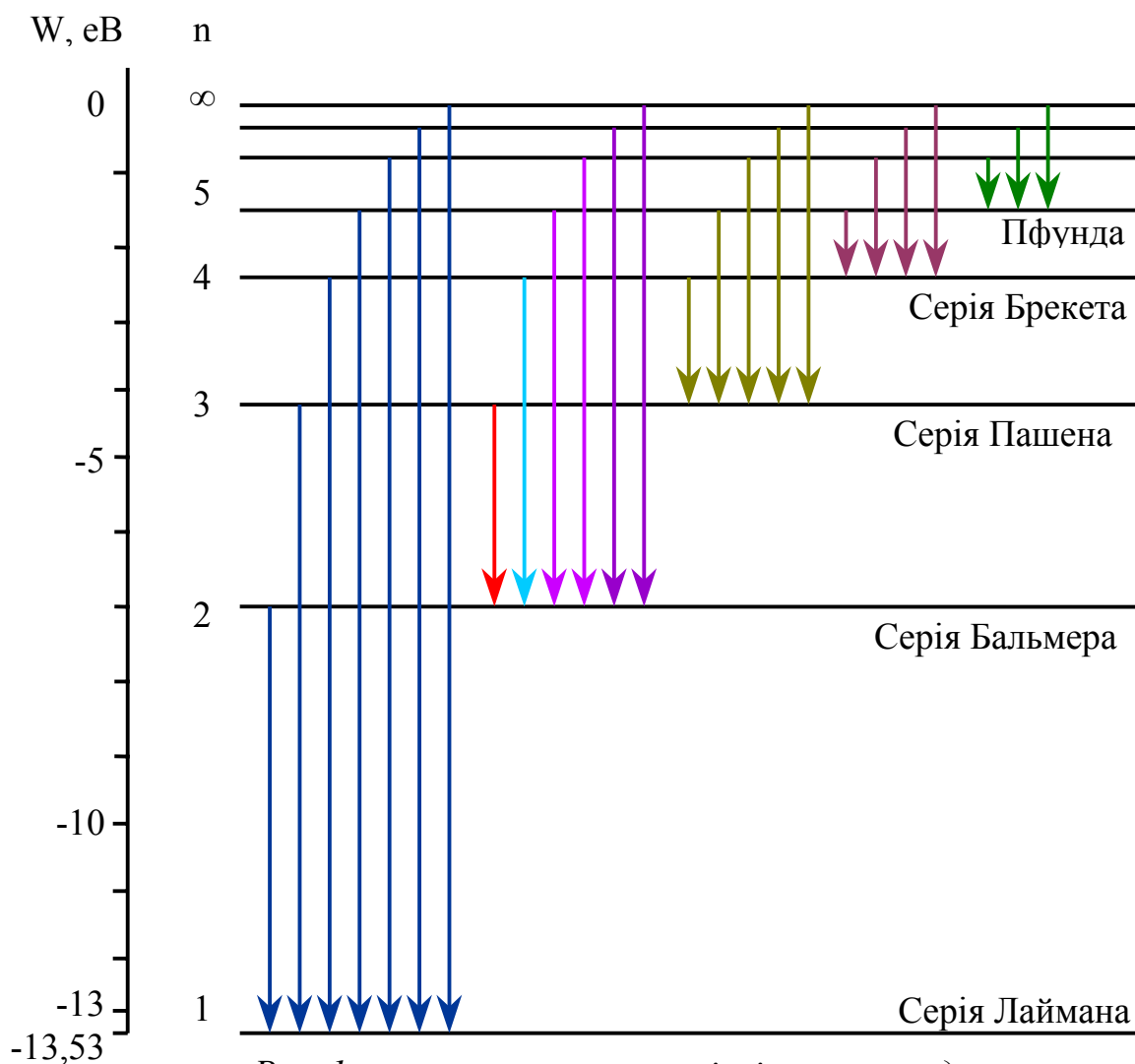


Рис. 1. схема енергетичних рівнів атома водню

Згідно з теорією Бора енергетичний стан, що відповідає головному квантовому числу  $n=1$ , називається основним (нормальним або незбудженим) станом. Усі стани з  $n>1$  збуджені.

Перехід атомів газу з основного стану в збуджений легко здійснити за допомогою електричного розряду в розрідженому газі. Перехід атомів із збудженого стану в основний проходить спонтанно з випромінюванням ліній усіх серій.

### Хід роботи

1. Перевірити градування монохрометра, виконане в лабораторній роботі №1.
2. Поставити на оптичну лаву прилад СПЕКТР-1, встановити в нього водневу трубку.
3. Ввімкнути прилад СПЕКТР-1 в сітку 220 В і домогтися яскравого зображення спектральних ліній водню.
4. Дивлячись в окуляр монохроматора, встановити поворотом барабана довжин хвиль кожен спектральну лінію випромінювання водню напроти

візиря в окулярі монохроматора і провести відлік їхніх розміщень за шкалою барабана довжин хвиль.

5. Користуючись кривою градування монохроматора, визначити довжини хвиль кожної лінії.

6. Ознайомитись з лінійчастим спектром гелію.

7. Використовуючи формулу (8), для кожного значення  $\lambda_\alpha, \lambda_\beta, \lambda_\gamma, \lambda_\delta$  спектра водню визначити сталу Рідберга і знайти її середнє значення,

8. Розрахувати за формулою (9) сталу Планка і обчислити її середнє значення,

### **Контрольні запитання**

1. Чому неперервно-випромінюючий електрон за законами електродинаміки повинен впасти на ядро? Як обходиться це в теорії Бора?

2. Перерахуйте основні досліди, які підтверджують існування в атомів складної структури.

3. Сформулюйте постулати Бора.

4. Поясніть зміст негативного значення енергії електрона.

5. Виведіть вираз для частоти обертання електрона по круговій орбіті.

### **Література**

1. Глауберман А.Ю., Манакин Л.О. Фізика атома та квантова механіка. К., Вища школа, 1972 .
2. Белый М.И., Охрименко Б.А. Атомная физика. К., Высшая школа, 1984.
3. Кортнев А.В., Рублев Ю.В., Куценко А.М. Практикум по физике. М., Высшая школа, 1965.
4. Лабораторные занятия по физике / Под ред. Гольдина. М., Наука, 1983.

## Лабораторна робота № 6

### Вивчення спектрів лужних металів

**Мета:** Дослідити спектр атома натрію у видимій області, розрахувати енергетичні рівні і визначити приналежність ліній до тієї чи іншої серії

**Прилади і матеріали:** Монохроматор УМ-2, неонова лампа, дугова натрієва лампа високого тиску ДнаС-18

### Теоретичні відомості

#### Сpektри лужних металів

Електронні оболонки атомів лужних металів *Li, Na, K, Rb, Cs, Fr* мають однакову будову – на зовнішній оболонці знаходиться один електрон в стані *ns*. Основним його термом є  $^2s_{1/2}$ . Заповнені оболонки дуже стійкі, оскільки їх будова така ж, як і у атомів благородних газів. Зовнішній *s*-електрон, названий оптичним або валентним, визначає як оптичні, так і хімічні властивості цих елементів. Ефективне поле, в якому рухається цей електрон, центральносиметричне, оскільки заповнені оболонки завжди мають нульовий повний орбітальний момент і повний спін. Якщо в атомі водню ядро прямо впливає на єдиний електрон, то в лужних металах на *s*-електрон впливає не тільки ядро, але і електрони, що входять в заповнені оболонки (табл. 1). Їх сукупність називається атомною серцевиною. На великих відстанях ефективне поле серцевини співпадає з кулонівським полем заряду *e*, оскільки електрони замкнутих оболонок екранують поле ядра. На малих відстанях (поблизу ядра) екранування відсутнє, і роль заповнених оболонок зводиться до створення деякого постійного потенціалу  $U_0$ . Проте на будь-якій відстані від ядра крива  $U(r)$  проходить нижче від кулонівського потенціалу  $-e^2/r$ , тому рівень з головним квантовим числом *n*, і орбітальним числом *l* знаходиться нижче від відповідного рівня атома водню

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}, \quad (1)$$

де *R* – стала Рідберга (див. рис. 1)

Назва елемента	Символ	<i>Z</i>	Електронна конфігурація
Літій	Li	3	$1s^2 2s$
Натрій	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
Калій	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$

Таблиця 1. Електронні конфігурації атомів лужних металів

Якщо положення рівнів в атомі водню описується формулою Н.Бора, то для лужних елементів справедлива формула Ридберга-Рітца

$$E_{nl} = -\frac{Rhc}{(n+\sigma)^2}, \quad (2)$$

де  $\sigma = \alpha + \frac{\beta}{n^2}$ . Величина  $\alpha < 0$  і називається поправкою Ридберга і перевищує за абсолютною величиною  $\beta$ , яку називають поправкою Рітца. Ця формула одер-

жана Ридбергом емпіричним шляхом. Величина  $\Delta = |\sigma|$  носить назву «квантового дефекту».

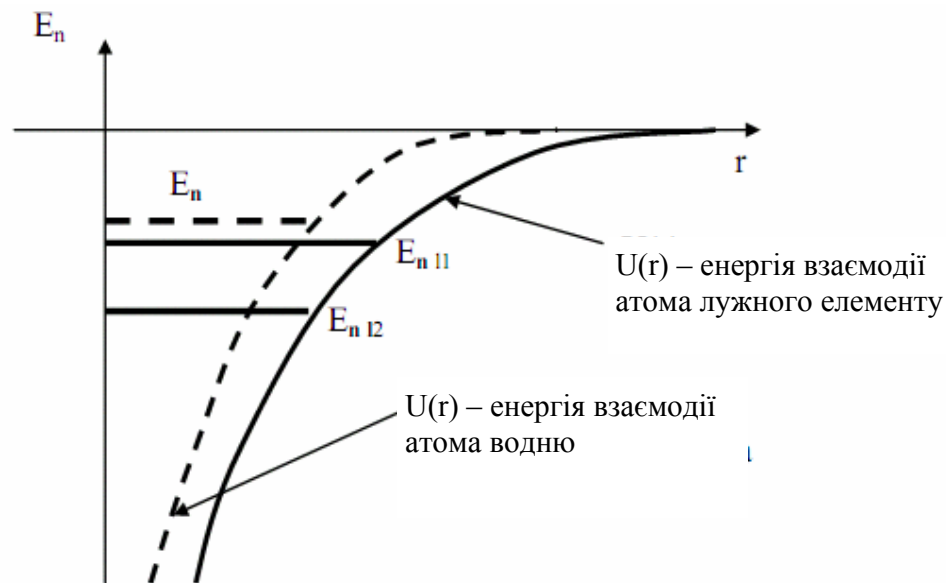


Рис. 1. Енергетичний спектр атома водню і атома лужних металів

Величина  $\Delta$  залежить від орбітального числа  $l$ . При малих  $l$  електрон проникає всередину серцевини, що спричиняє сильне зміщення рівнів. Значно слабше квантовий дефект залежить від головного квантового числа  $n$ . (див. Додаток)

Загальна структура спектрів визначається переходами  $s - p$ ,  $p - d$ ,  $d - f$  і т.д. при умові відбору  $\Delta l = \pm 1$ . З цих переходів формуються серії, подібні до спектру водню.

Головна серія виникає при комбінаціях термів  $nS$  і  $n'P$ . Лінії головної серії спостерігаються як при поглинанні, так і при випромінюванні. Перші лінії цієї серії є резонансними. Це означає, що при оптичному збудженні атом повертаючись в основний стан, випромінює фотон з тією ж частотою  $\nu$ , що і поглинутий фотон. Коли ж відбувається оптичне збудження рівня, з якого можливі переходи не тільки на основний рівень, але і на інші збуджені рівні, то поряд з резонансними спостерігається випромінювання з частотами, меншими від частоти резонансної лінії.

Потенціали іонізації і резонансні потенціали атомів лужних металів невеликі, порядку 1,5 – 2 еВ. Тому атоми легко збуджуються навіть в порівняно низькотемпературних джерелах.

Основні спектральні серії розташовані у видимій і інфрачервоній області спектру (рис. 2.).

Оптичний спектр натрію широкий – (9085–246) нм. У ньому виділяються декілька серій, вже згаданих вище.



Рис. 2. Спектральні серії атома Na, межі серій показані штриховкою

Головна серія спектру поглинання і випромінювання натрію розташована у видимій і ближній ультрафіолетовій ділянці (589,6 – 246,4) нм., виникає при переходах між енергетичними рівнями  $3s - np$ ;  $(3^2S_{1/2} - n^2P_{1/2,3/2})$  ( $n=3, 4, 5...$ ). Тут знаходяться знамениті яскраві дублетні лінії  $D_1 = 589,592$  нм і  $D_2 = 588,995$  нм, розташовані в жовтій області спектру і є найяскравішим оптичним свідченням існування спіну електрона.

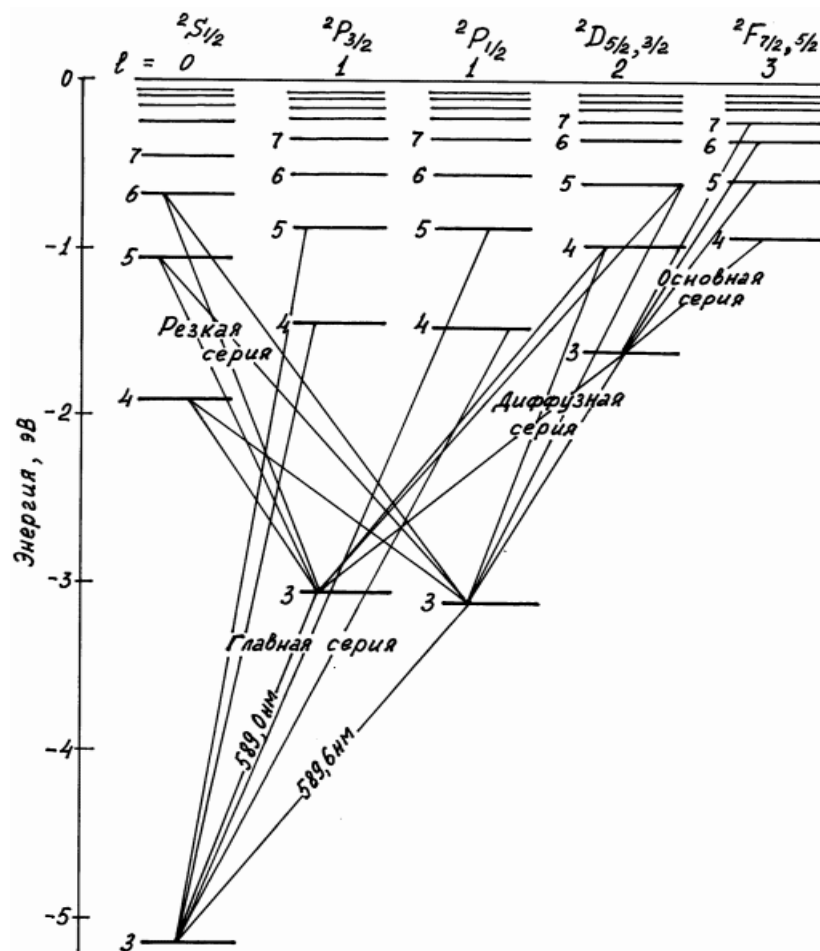


Рис. 3. Схема рівнів атома натрію і переходи між ними, що приводять до утворення серій



Дифузна серія – при переходах  $3p - nd$ ;  $(3^2P_{1/2,3/2} - n^2D_{3/2,5/2})$  ( $n=4, 5...$ ), які займають ділянку спектру (568,8–423,9) нм.

Різка серія з окресленими краями – при переходах  $3p - ns$ ;  $(3^2P_{1/2,3/2} - n^2S_{1/2})$  ( $n=4, 5...$ )

Серія Бергмана (основна) – при переходах  $3d - nf$ ;  $(3^2D_{3/2,5/2} - n^2F_{5/2,7/2})$  ( $n=4, 5...$ ) займає інфрачервоний діапазон (1846,5–894,3) нм.

Окрім цих серій є ще і інші, лінії яких лежать в далекій інфрачервоній області спектру:  $4f - ng$ ;  $(4^2F - n^2G)$  ( $n=5,6...$ ),  $5g - nh$ ;  $(5^2G - n^2H)$  ( $n=6,7...$ ).

Якщо поглянути на діаграму атома *Na*, то ми побачимо лінії переходів, що су-перечать правилу відбору  $\Delta l = \pm 1$ . Це так звані «заборонені лінії», що підлягають правилу відбору  $\Delta l = \pm 2$ . Ці лінії  $3s - nd$ ;  $(3^2S - n^2D)$  ( $n=3,4...$ ) і  $3p - nf$ ;  $(3^2P - n^2F)$  ( $n=4,5...$ ) дуже слабкі.

### Довжини хвиль

Довжини хвиль ліній атома лужного металу визначаються із загальної формули:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{(n_1 - \Delta_i)^2} - \frac{1}{(n_2 - \Delta_k)^2} \right) \quad (3)$$

(Індекси  $i, k$  означають залежність квантового дефекту від орбітального квантового числа  $l=0,1, 2, \dots (n-1)$ .)

для різкої серії формула приймає вигляд:

$$\frac{1}{\lambda_{n,s}} = R \left( \frac{1}{(3 - \Delta_p)^2} - \frac{1}{(n - \Delta_s)^2} \right), n = 4, 5, \dots, \quad (4)$$

а для дифузної серії -

$$\frac{1}{\lambda_{n,d}} = R \left( \frac{1}{(3 - \Delta_p)^2} - \frac{1}{(n - \Delta_d)^2} \right), n = 3, 4, \dots \quad (5)$$

У формулах  $R$  – стала Ридберга,  $\hbar$  – стала Планка,  $m$  – маса спокою електрона,  $e$  – його заряд,  $n_1, n_2$  – головні квантові числа,

### Опис установки

#### 1. Призначення

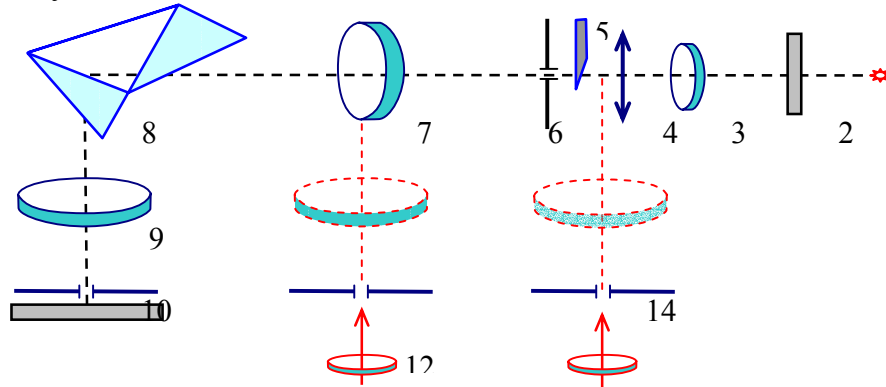
Монохроматор УМ-2 призначений для різних спектральних досліджень і розв'язку ряду аналітичних задач. Із змінними насадками прилад може служити як спектроскоп. Набір кювет з тримачами і конденсорами призначений для абсорбційного аналізу. Фотоелектричний пристрій, який представляє собою фотоелемент з гальванометром, призначений для виміру інтенсивності спектральних ліній.

Монохроматор УМ-2 виділяє монохроматичні ділянки спектру в видимій і близькій інфрачервоній областях в діапазоні хвиль від 3800 до 10000 А.

## 2. Оптична схема і принцип дії приладу

Світло через вхідну щілину падає на об'єктив коліматора і паралельним пучком проходить диспергуючу призму. Під кутом  $90^\circ$  до падаючого пучка світла розміщується вихідна труба монохроматора.

Повертаючи призмийний столик на різні кути відносно падаючого пучка світла, отримують в вихідній щілині світло різної довжини хвилі, яке проходить через призму в мінімумі відхилення.



- 1 — джерело світла;
- 3 — конденсор;
- 5 — призма порівняння;
- 7 — об'єктив коліматора;
- 9 — об'єктив зорової труби;
- 11 — захисне скло;
- 13 — окуляр  $10\times$ ;

- 2 — захисне скло кожуха лампи;
- 4 — лінза;
- 6 — вхідна щілина;
- 8 — диспергуюча призма;
- 10 — вихідна щілина;
- 12 — окуляр  $5\times$ ;
- 14 — покажчик в фокальній площині зорової труби.

### Натрієва лампа.

Джерелом досліджуваного спектру служить натрієва лампа ДНас-18, що є скляною трубкою, в якій розряд відбувається в парах натрію. Електрони, прискорені електричним полем розряду, при непружних зіткненнях з атомами натрію передають їм свою енергію. При цьому внутрішня енергія атома зростає - його оптичний електрон переходить з основного стану в збуджений (тобто на будь-який вищерозташований енергетичний рівень). У збудженому стані атом знаходиться певний час. Потім оптичний електрон з верхнього рівня переходить або безпосередньо в основний стан (якщо це не заборонено правилами відбору), або на який-небудь розташований нижче рівень, а вже з нього в основний стан. При цих переходах електрона різниця його енергій на різних рівнях випромінюватиметься у вигляді фотонів тієї або іншої довжини хвилі. Так виникає емісійний лінійчатий спектр натрію.

Натрієва лампа поміщена в захисний металевий кожух і за допомогою тримача встановлюється на оптичній лаві перед вхідною щілиною УМ-2. Лампу вмикають в коло змінного струму за стандартною схемою послідовно із дроселем.

### Запобіжні заходи

Натрієва лампа знаходиться в металевому корпусі з невеликим віконцем. Віконце корпусу лампи закрито склом, що затримує ультрафіолетове випромінювання. Знімати корпус лампи і скло забороняється! Під час роботи необхідно стежити, щоб пряме проміння від джерела випромінювання не потрапляло в очі. Після вимкнення лампи повторне запалення електричного розряду в ній стає можливим тільки після її охолодження не менше ніж через 10 - 15 хвилин.

### Завдання

1. До початку роботи в лабораторії за формулою (1) додатку, використовуючи дані таблиці 1 розрахувати в електрон-вольтах енергії рівнів з  $n = 3, 4, 5, 6, 7$  і  $l = 0, 1, 2, 3$ . В масштабі зобразити схему рівнів.

2. На схемі рівнів зобразити переходи, що відповідають головній, різкій, дифузній і основній серіям.

3. За формулою (3) розрахувати довжини хвиль, що відповідають вище вказаним серіям і записати їх поряд з переходами.

### Хід роботи

1. Встановити на оптичну лаву неонову лампу, підключити її і одержати спектр  $Ne$ . Визначити кутове положення жовтої спектральної лінії  $Ne$  і звірити її положення з кривою градування. (при потребі відкоригувати положення барабана)

2. Поставити на оптичну лаву натрієву лампу, підключити її і одержати спектр  $Na$ . Визначити кутове положення спектральних ліній  $Na$ .

4. За допомогою кривої градування визначити довжини хвиль ліній. Схематично зобразити спектр і проставити поряд довжини хвиль.

5. Зобразити на схемі рівнів переходи, що відповідають спостережуваним (видимим) лініям спектру атома  $Na$ .

7. Обчислити для спостережуваних ліній  $Na$  енергії фотонів  $\varepsilon$  в еВ  $\varepsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ ,

для цього зручно використати формулу  $\varepsilon(\text{eV}) \cdot \lambda(\text{нм}) = 1241$  і занести в табл.

№	колір	кут ф відн.од.	$\lambda$ , нм	$\varepsilon$ , еВ	серія	перехід
1	червоно-оранжева					
2	жовта (яскрава)					
3	жовто-зелена					
4	зелена					
5	зелено-голуба					
6	синьо-голуба					
7	синьо-голуба					

8. Порівняти експериментальні і обчислені значення.

Зробити висновок.

### Контрольні запитання

1. Будова електронних оболонок атомів лужних металів. Виписати заповнення оболонок *Na*
2. Особливості спектру атомів лужних металів.
4. Виписати спектроскопічні позначення основних станів атомів *K, Rb, Cs*
5. Кожен рядок таблиці Менделєєва починається з лужного елемента і закінчується інертним газом. При цьому потенціал іонізації на межі переходу різко змінюється (*Ne* – 21,5 еВ, *Na* – 5,1 еВ). Дати пояснення.
6. Які стани атомів лужних елементів мають водневоподібну структуру рівнів?
7. Використовуючи схему рівнів енергії *Na* і правила відбору вказати всі можливі переходи із *5s* стану в основний стан.
8. Які з перерахованих нижче переходів заборонені правилами відбору?  
 ${}^2D_{3/2} - {}^2P_{1/2}, \quad {}^2D_{3/2} - {}^2S_{1/2}, \quad {}^2F_{5/2} - {}^2P_{3/2}, \quad {}^2F_{7/2} - {}^2D_{5/2}$
9. Чим відрізняється головна серія від дифузної і серії Бергмана з погляду структури ліній? (див. правила відбору)

### Література

1. Шпольский Э.В. Атомная физика. -М.: Наука, 1983, т. II.
2. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. -М.: Наука, 1988, гл. VI.
3. Матвеев А.Н. Атомная физика. -М.: Высшая школа, 1989.
4. Стриганов А. Р., Свентицкий Н. С. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Атомиздат, 1966.
5. Одинцова Г. А., Стриганов А. Р. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Энергоатомиздат, 1982.
6. Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: 3-е изд., М.: КомКнига, 2006.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, М.: Наука, 1989.

### Додаток до лабораторної роботи № 6

Енергії станів  $nl$  виражаються формулою

$$E_{nl} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n - \Delta_l)^2} = -\frac{Rhc}{(n - \Delta_l)^2} = -\frac{R_y}{(n - \Delta_l)^2}, \quad n = 3, 4, \dots, \quad (1)$$

де  $R = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}$ , а  $R_y = \frac{me^4}{2\hbar^2}$  – ридберг (13,6 еВ) ( $Rhc = A = R_y$  (Ридберг))  $1R_y = 13,6$  еВ – енергія іонізації атома водню (із основного стану)

Відмінність від атома водню полягає у тому, що  $n - \Delta_l$  вже не ціле число, як у випадку водню, а відрізняється від відповідного головного квантового числа  $n$  на величину  $\Delta_l$ , ( $\Delta_l > 0$ ), яку називають квантовим дефектом.

$n$	$l$			
	0	1	2	3
	$s$	$p$	$d$	$f$
3	1,373	0,883	0,013	–
4	1,358	0,867	0,011	0
5	1,353	0,862	0,011	0
6	1,341	0,862	0,011	0

Таблиця 1. Значення квантового дефекту для атома натрію

$Z$	елемент	$a$	$a_1$
3	Li	1,98	2,02
11	Na	9,58	7,45
19	K	17,24	13,03
37	Rb	34,82	26,95
55	Cs	52,45	40,8

Таблиця 2. Значення сталих  $a$  і  $a_1$  для лужних елементів

$$R = \frac{me^4}{8\hbar^3 \epsilon_0^2 c} \text{ стала Ридберга } R = 10\,967\,758 \text{ м}^{-1}$$

Якісне порівняння атома  $Na$  з воднем в моделі Бора-Зоммерфельда. Через зміну потенціальної енергії електрона змінюються його траєкторії.

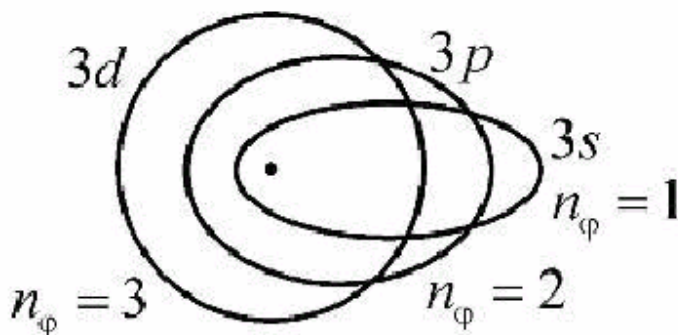


Рис. 1.2 Три орбіти електрона атома водню для  $n=3$

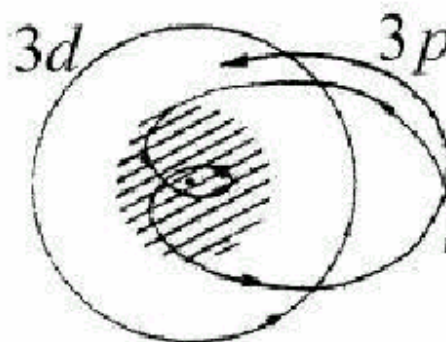


Рис. 2.2 Якісне зображення двох борівських траєкторій оптичного електрона в полі атомної серцевини  $Na$

## Лабораторна робота № 7

### Вивчення тонкої структури спектрів лужних металів

**Мета:** Вивчити тонку структуру енергетичних рівнів атома натрію на прикладі жовтого дублету, визначити експериментально сталу внутрішнього екранування  $a_1$

**Прилади і матеріали:** Монохроматор УМ-2, неонова лампа, натрієва лампа

### Теоретичні відомості,

#### Тонка структура спектрів

У атомах лужних металів, як і в атомі водню, врахування спіну електрона приводить до появи тонкої структури рівнів і спектральних ліній, тобто до їх розщеплення на декілька близько розташованих компонент. Через спін-орбітальну взаємодію маємо,  $j = l + s$ , звідки  $j = l \pm \frac{1}{2}$ . В результаті кожен рівень з  $l \neq 0$  розщеплюється на два (дублетне розщеплення). Для  $s$ -рівня  $j = l + s = 1/2$ , і розщеплення немає.

Лінії головної і різкої серій розщеплюються на два компоненти (дублети). Дублетне розщеплення ліній головної серії визначається тонкою структурою верхніх рівнів  ${}^2P_{1/2,3/2}$ , оскільки нижній рівень не розщеплюється (рис. 1а). Розщеплення ліній різкої серії, навпаки, повністю визначаються тонкою структурою нижнього рівня  $3{}^2P_{1/2,3/2}$  (рис. 1б), тому всі лінії різкої серії мають в шкалі частот чи хвильових чисел однакове дублетне розщеплення. На рис. 2 подана схема утворення дублетних ліній головної і різкої серій.

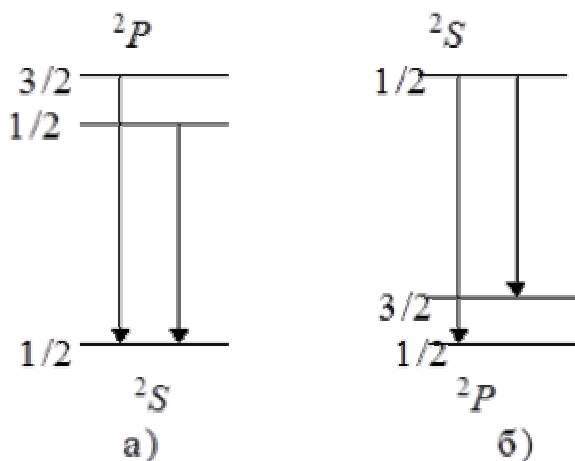


Рис. 1

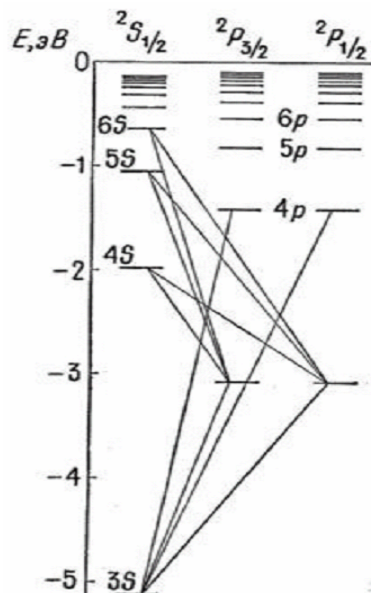


Рис. 2

Лінії дифузної і фундаментальної серій розщеплюються на три компоненти (триплети). Відстань між компонентами  ${}^2P_{1/2} - {}^2D_{3/2}$  і  ${}^2P_{3/2} - {}^2D_{3/2}$  триплету определяется расщеплением нижнего уровня и однакова для всіх ліній серії. Відстань між компонентами  ${}^2P_{3/2} - {}^2D_{3/2}$  і  ${}^2P_{3/2} - {}^2D_{5/2}$  того ж триплету, що визначається

розщепленням верхнього рівня, значно менша по величині і швидко спадає для вищих членів серії. При невеликій роздільній здатності спектрального приладу ці компоненти не розділяються, тому лінії дифузної серії мають вигляд розмитих дублетів. Схема розщеплених на три компоненти ліній дифузної серії показана на рис.3

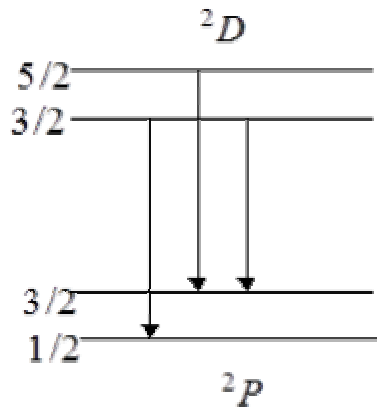


Рис.3

Аналогічним чином можна проаналізувати тонку структуру ліній фундаментальної серії.

Узагальнена структура розщеплення  $p, d, f$  рівнів представлена на рис. 4.

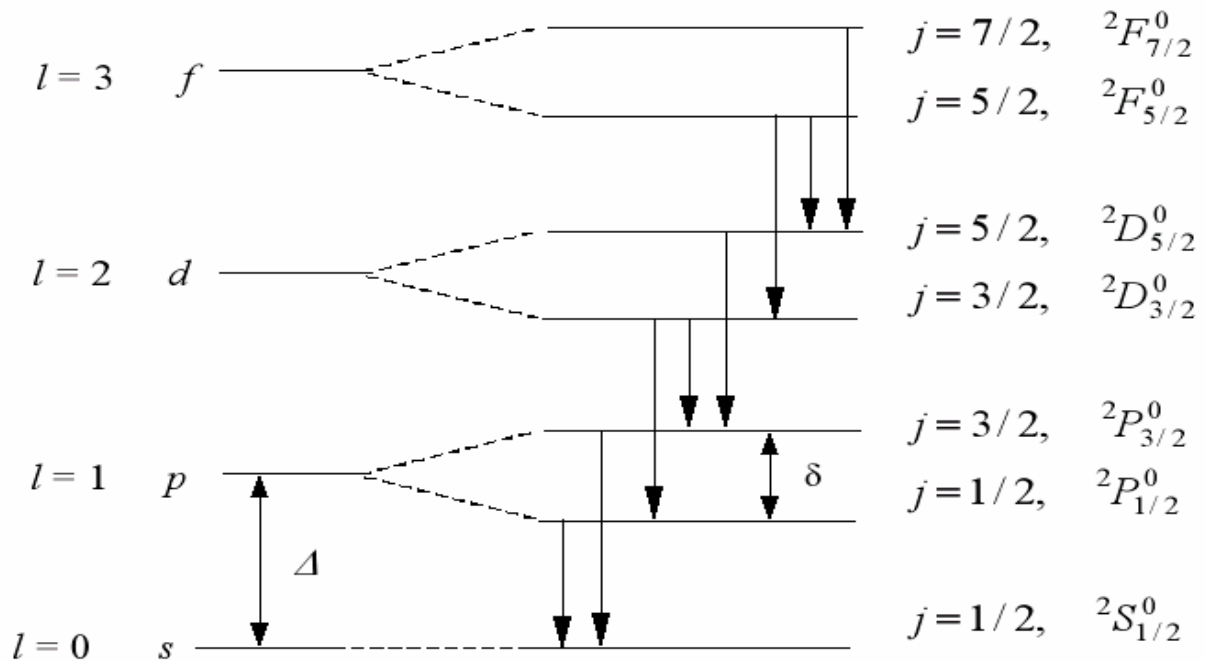


Рис. 4. Дублетне розщеплення термів атомів лужних металів  
(масштаб умовний, насправді  $\delta \ll \Delta$ )

Саме для атомів лужних металів вплив спіну проявляється найвиразніше. Це відбувається тому, що рівні з різними значеннями  $l$  при заданому значенні  $n$  знаходяться далеко один від одного. Так, у  $Na$  відстань між рівнями  $3s$  і  $3p$  становить 2,1 еВ.

Величина дублетного розщеплення рівня (різниця енергій між підрівнями  $j_1 = l + \frac{1}{2}$  і  $j_2 = l - \frac{1}{2}$  одного і того ж рівня  $n, l$ ) дорівнює:

$$\Delta E_{j_1, j_2} = \frac{Rhc}{n^2} \cdot \frac{\alpha^2(Z - a_1)^4}{n} \cdot \frac{l}{l(l+1)} = \frac{\alpha^2 R_y (Z - a_1)^4}{n^3 l(l+1)} = \frac{\alpha^2 R_y}{n^3 l(l+1)} Z_{ef}^4,$$

де  $\alpha = \frac{2\pi e^2}{hc} \approx \frac{1}{137}$ , – постійна тонкої структури;  $Z_{ef} = (Z - a_1)$ ,  $a$  – стала екранування,  $a_1$  – стала внутрішнього екранування, визначає енергію спин-орбітальної взаємодії, (див. додаток)

Ширина дублетного розщеплення змінюється від елемента до елемента. Наприклад, для  $Li$  величина тонкого розщеплення  $^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$  становить  $\Delta \tilde{\nu} = 0,34 \text{ см}^{-1}$ , а у  $Cs$  –  $554,1 \text{ см}^{-1}$ .  $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$  т.з. спектроскопічне хвильове число. Дублетне розщеплення ліній в шкалі хвильових чисел дорівнює

$$\Delta \tilde{\nu} = R \frac{\alpha^2 Z_{ef}^4}{n^3 l(l+1)}.$$

Практично для тонкого розщеплення зручно користуватися формулою:

$$\Delta \tilde{\nu} = 5,82 \frac{Z_{ef}^4}{n^3 l(l+1)} \text{ см}^{-1}.$$

Величина розщеплення дублету  $3p - 3p; (3^2P_{1/2} - 3^2P_{3/2})$  становить  $17,0 \text{ см}^{-1}$ . Квантовий дефект для  $s$ -станів дорівнює  $3s - 1,37$ ;  $4s - 1,36$ ;  $5s - 1,35$  і т.д.

## **Опис установки**

### **1. Призначення**

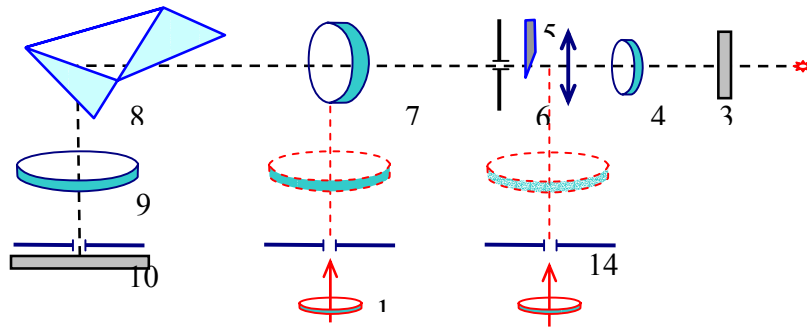
Монохроматор УМ-2 призначений для різних спектральних досліджень і розв'язку ряду аналітичних задач. Із змінними насадками прилад може служити як спектроскоп. Набір кювет з тримачами і конденсорами призначений для абсорбційного аналізу. Фотоелектричний пристрій, який представляє собою фотоелемент з гальванометром, призначений для виміру інтенсивності спектральних ліній.

Монохроматор УМ-2 виділяє монохроматичні ділянки спектру в видимій і близькій інфрачервоній областях в діапазоні хвиль від 3800 до 10000 Å.

### **2. Оптична схема і принцип дії приладу**

Світло через вхідну щілину падає на об'єктив коліматора і паралельним пучком проходить диспергуючу призму. Під кутом  $90^\circ$  до падаючого пучка світла розміщується вихідна труба монохроматора.





- |                               |  |
|-------------------------------|--|
| 1 — джерело світла;           | 2 — захисне скло кожуха лампи;                   |
| 3 — конденсор;                | 4 — лінза;                                       |
| 5 — призма порівняння;        | 6 — вхідна щілина;                               |
| 7 — об'єктив коліматора;      | 8 — диспергуюча призма;                          |
| 9 — об'єктив зорової труби;   | 10 — вихідна щілина;                             |
| 11 — захисне скло;            | 12 — окуляр 5 <sup>x</sup> ;                     |
| 13 — окуляр 10 <sup>x</sup> ; | 14 — покажчик в фокальній площині зорової труби. |

Повертаючи призмийний столик на різні кути відносно падаючого пучка світла, отримують в вихідній щілині світло різної довжини хвилі, яке проходить через призму в мінімумі відхилення.

### ***Натрієва лампа.***

Джерелом досліджуваного спектру служить натрієва лампа ДНаС-18, що є скляною трубкою, в якій розряд відбувається в парах натрію. Електрони, прискорені електричним полем розряду, при непружних зіткненнях з атомами натрію передають їм свою енергію. При цьому внутрішня енергія атома зростає - його оптичний електрон переходить з основного стану в збуджений (тобто на будь-який вищерозташований енергетичний рівень). У збудженому стані атом знаходиться певний час. Потім оптичний електрон з верхнього рівня переходить або безпосередньо в основний стан (якщо це не заборонено правилами відбору), або на який-небудь розташований нижче рівень, а вже з нього в основний стан. При цих переходах електрона різниця його енергій на різних рівнях випромінюватиметься у вигляді фотонів тієї або іншої довжини хвилі. Так виникає емісійний лінійчатий спектр натрію.

Натрієва лампа поміщена в захисний металевий кожух і за допомогою тримача встановлюється на оптичній лаві перед вхідною щілиною УМ-2. Лампу вмикають в коло змінного струму за стандартною схемою по-слідовно із дроселем.

### ***Запобіжні заходи***

Натрієва лампа знаходиться в металевому корпусі з невеликим віконцем. Віконце корпусу лампи закрите склом, що затримує ультрафіолетове випромінювання. Знімати корпус лампи і скло забороняється! Під час роботи необхідно стежити, щоб пряме проміння від джерела випромінювання не потрапляло в очі. Після ви-

ключення лампи повторне запалення електричного розряду в ній стає можливим тільки після її охолодження не менше ніж через 10 - 15 хвилин.

### Завдання

1. До початку роботи розрахувати величину дублетного розщеплення  $3p$  рівня атома натрію  $\Delta E$  і  $\Delta \tilde{\nu}$ .
2. Записати позначення переходів для дублетів головної і різкої серій.

### Хід роботи

3. Встановити на оптичну лаву неонову лампу, підключити її і одержати спектр. Визначити кутове положення таких ліній  $Ne$ : 585,25 нм; 588,19 нм; 594,48 нм.

Обчислити кутову дисперсію  $D_\varphi = \frac{\Delta\varphi}{\Delta\lambda}$ .

4. Поставити на оптичну лаву натрієву лампу, підключити її і одержати жовтий дублет  $Na$ . Визначити кутове положення його ліній.

5. За кутовим положенням і дисперсією визначити довжини хвиль дублету  $Na$ . (див. додаток)

6. Обчислити розщеплення в нм,  $см^{-1}$ , eV і занести в табл.

жовта лінія	кут $\varphi$ відн.од.	$\lambda$ , нм	$\tilde{\nu}$ , $см^{-1}$	$\epsilon$ , eV	перехід
лінія випромінювання 1					
лінія випромінювання 2					
лінія поглинання 1					
лінія поглинання 2					
величина розщеплення					

7. Вивести робочу формулу і обчислити поправку внутрішнього екранування  $a_l$

8. Залишити зорову трубу в положенні, наведеному на жовту лінію. Збільшити напругу, що подається на лампу. Спостерігати за зміною спектру з часом. У міру наростання дугового розряду ширина жовтої лінії випромінювання збільшується. Потім відбувається так зване явище обернення лінії  $Na$ . У центрі широкої жовтої лінії виникає чорний дублет поглинання. Атоми натрію що знаходяться в основному стані оддалік області дугового розряду, поблизу стінок, розрядної трубки резонансно поглинають випромінювання атомів натрію, що йде з області розряду. Це доводить, що дублет належить головній серії.

### Контрольні запитання

1. В чому суть спин-орбітальної взаємодії?
2. Фізична причина дублетної структури рівнів енергії.
3. Від чого залежить дублетне розщеплення?
4. Внесок в розщеплення спіну і релятивістських поправок.
5. Що таке  $Z_{\text{ef}}$ ?
5. Тонка структура спектру атома *Na*.
6. Яка тонка структура ліній в різних серіях?

### Література

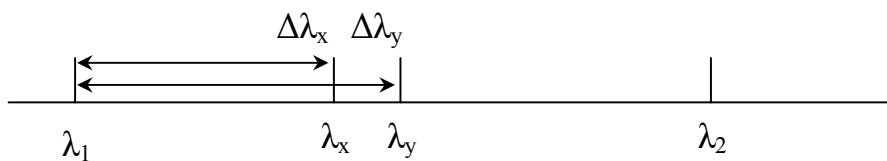
1. Шпольский Э.В. Атомная физика. -М.: Наука, 1983, т. II.
2. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. -М.: Наука, 1988, гл. VI.
3. Матвеев А.Н. Атомная физика. -М.: Высшая школа, 1989.
4. Стриганов А. Р., Свентицкий Н. С. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Атомиздат, 1966.
5. Одинцова Г. А., Стриганов А. Р. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Энергоатомиздат, 1982.
6. Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия: 3-е изд., М.: КомКнига, 2006.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, М.: Наука, 1989.

### Додаток до лабораторної роботи № 7

Z	елемент	a	a <sub>1</sub>
3	Li	1,98	2,02
11	Na	9,58	7,45
19	K	17,24	13,03
37	Rb	34,82	26,95
55	Cs	52,45	40,8

Таблиця 2. Значення сталих  $a$  і  $a_1$  для лужних елементів

Кутова дисперсія  $D_\varphi = \frac{\Delta\varphi}{\Delta\lambda}$  визначає кутову відстань  $\Delta\varphi$  між двома спектральними лініями, що різняться довжиною хвилі на  $\Delta\lambda$ . Вона характеризує здатність диспергуючого елемента відхиляти промені різних довжин хвиль на різні кути і визначається тільки властивостями матеріалу призми.



$$\lambda_1 \rightarrow \varphi_1; \quad \lambda_2 \rightarrow \varphi_2; \quad \lambda_x \rightarrow \varphi_x; \quad \lambda_y \rightarrow \varphi_y;$$

$$\lambda_1 = 588,19 \text{ нм}; \quad \lambda_2 = 594,48 \text{ нм}.$$

$$D_\varphi = \frac{\Delta\varphi}{\Delta\lambda} = \frac{\varphi_2 - \varphi_1}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

$$\lambda_x = \lambda_1 + \Delta\lambda_x = \lambda_1 + 1/D \cdot \Delta\varphi_x = \lambda_1 + 1/D \cdot (\varphi_x - \varphi_1),$$

$$\lambda_y = \lambda_1 + \Delta\lambda_y = \lambda_1 + 1/D \cdot \Delta\varphi_y = \lambda_1 + 1/D \cdot (\varphi_y - \varphi_1).$$

**МІНІСТЕРСТВО ОБОРОНИ УКРАЇНИ**

**Житомирський військовий  
інститут радіоелектроніки  
імені С.П. Корольова**

**І.С. Сапожников**

## **Ф І З И К А**

**Основи квантової фізики  
та ядерної фізики**

**Затверджено начальником  
військового інституту для курсантів  
та студентів інституту**

**Житомир  
2006**

## УДК - 535

*Рекомендовано до друку вченою радою Житомирського військового інституту радіоелектроніки імені С.П. Корольова (протокол № 20 від 11 липня 2006 року)*

Сапожников І.С. Фізика. Основи квантової фізики та ядерної фізики. – Житомир: ЖВІРЕ, 2006. - 212 с.

Навчальний посібник розроблений відповідно до чинної програми курсу загальної фізики для вищих технічних навчальних закладів.

В посібнику розглядаються основні закони, поняття та уявлення нерелятивістської квантової механіки (розділ I), а також найважливіші закономірності й поняття фізики атомного ядра та елементарних частинок (розділ II). Матеріал подається максимально стисло, після кожної глави наводяться головні висновки.

У зв'язку зі складністю матеріалу та досить складним і математизованим викладенням його в підручниках, на думку автора, посібник може бути корисним при першому ознайомленні з відповідними розділами курсу фізики.

Підготував І.С.Сапожников.

Рецензенти: кандидат технічних наук, доцент В.І. Черников; кандидат технічних наук, доцент М.Д. Петрук.

<b>Передмова</b> .....	3
<b>Розділ I. ОСНОВИ КВАНТОВОЇ ФІЗИКИ</b>	
<b>Глава 1. Квантова природа електромагнітного випромінювання</b> .....	5
§ 1.1. Теплове випромінювання та його особливості .....	5
§ 1.2. Абсолютно чорне тіло. Закон Кірхгофа .....	7
§ 1.3. Закони випромінювання абсолютно чорного тіла .....	9
§ 1.4. “Ультрафіолетова катастрофа”. Формула Планка .....	12
§ 1.5. Зовнішній фотоэффект .....	15
§ 1.6. Гальмівне рентгенівське випромінювання .....	19
§ 1.7. Фотони. Корпускулярно-хвильовий дуалізм світла... ..	21
§ 1.8. Ефект Комптона .....	24
<b>Задачі</b> .....	27
<b>Стислі висновки</b> .....	29
<b>Глава 2. Хвильові властивості мікрочастинок</b> .....	32
§ 2.1. Гіпотеза і формула де Бройля .....	32
§ 2.2. Дифракція мікрочастинок .....	34
§ 2.3. Співвідношення невизначеностей .....	37
<b>Задачі</b> .....	43
<b>Стислі висновки</b> .....	45
<b>Глава 3. Елементи квантової механіки</b> .....	47
§ 3.1. Поняття хвильової функції .....	47
§ 3.2. Рівняння Шредінгера .....	49
§ 3.3. Частинка в одновимірній потенціальній ямі .....	51
§ 3.4. Тунельний ефект .....	54
§ 3.5. Квантовий гармонічний осцилятор .....	57
<b>Задачі</b> .....	59
<b>Стислі висновки</b> .....	61
<b>Глава 4. Фізика атомів і молекул</b> .....	64
§ 4.1. Будова атомів. Формула Бальмера .....	64
§ 4.2. Постулати Бора .....	67
§ 4.3. Атом водню в квантовій механіці .....	71
§ 4.4. Квантові числа .....	77
§ 4.5. Багатоелектронні атоми. Принцип Паулі .....	81
§ 4.6. Періодична система елементів Д.І.Менделєєва .....	86
§ 4.7. Характеристичні рентгенівські спектри .....	92
§ 4.8. Утворення молекул. Типи хімічного зв’язку .....	95
§ 4.9. Енергетичні рівні молекул. Молекулярні спектри ....	99
<b>Задачі</b> .....	102
<b>Стислі висновки</b> .....	107

## ПЕРЕДМОВА

Пропонований навчальний посібник написаний на основі лекцій загального курсу фізики, який автор читав курсантам і студентам протягом багатьох років у Житомирському військовому інституті радіоелектроніки ім. С.П. Корольова.

Враховуючи складність матеріалу з квантової фізики та ядерної фізики, труднощі, які виникають при його вивченні, була зроблена спроба викладення матеріалу в максимально доступній формі з використанням пояснювальних прикладів і рисунків. Крім того, після кількох параграфів, матеріал яких об'єднується в окрему главу, наводяться приклади розв'язання типових задач та подаються стислі висновки з метою виділення основних понять, особливостей або результатів аналізу поведінки мікрооб'єктів.

Починаючи вивчення квантової фізики, а відтак ядерної фізики, слід розуміти їх актуальність, роль і місце в загальній системі теоретичних знань і практичних досягнень. В кінці XIX – на початку XX століть почалось інтенсивне вивчення мікропроцесів – явищ, що відбуваються в невеликих просторових областях розміром  $\sim 10^{-8} \dots 10^{-15}$  м, тобто фізики атомів, молекул та елементарних частинок. В результаті низки експериментальних і теоретичних робіт була знайдена виключна своєрідність законів, що керують поведінкою мікрооб'єктів, які ніяк не вкладались у рамки старих фізичних уявлень. Основними специфічними властивостями мікросвіту є **квантування**, тобто дискретність деяких фізичних величин, що описують стан мікрооб'єктів, а також **хвильовий** характер їх поведінки у поєднанні з корпускулярними властивостями. Новий розділ фізики, що одержав назву **квантової механіки**, став теоретичною основою сучасного вчення про будову і властивості речовини. Квантова механіка дає відповідь на багато практичних питань, пов'язаних з будовою кристалів, їхніми оптичними, електричними та магнітними



властивостями. Завдяки квантовій механіці відбувається швидкий розвиток електроніки, лазерної техніки, матеріалознавства, які є визначальними для прискорення науково-технічного прогресу.

Розвиток **ядерної фізики** і розуміння процесів на рівні **мікрочастинок** також відбувались під впливом теоретичних досягнень квантової механіки. У поєднанні з фундаментальними висновками **спеціальної теорії відносності** були зроблені значні теоретичні й практичні кроки у використанні внутрішньоядерної енергії, взаємодії іонізуючого випромінювання з речовиною, систематизації елементарних частинок, розробці єдиної теорії взаємодії, пізнанні законів Всесвіту.

Хочеться сподіватись, що цей посібник стане у пригоді курсантам і студентам під час найпершого ознайомлення з не дуже простим, але важливим матеріалом курсу фізики, і дозволить більш раціонально використати навчальний час.

## Розділ I

# ОСНОВИ КВАНТОВОЇ ФІЗИКИ

## Глава 1. Квантова природа електромагнітного випромінювання

### § 1.1. Теплове випромінювання та його особливості

• Всі тіла випромінюють електромагнітні хвилі (EMX). Це може здійснюватись за рахунок різних джерел енергії. Найбільш поширеним є **теплове випромінювання**, тобто випромінювання за рахунок внутрішньої енергії тіл, пов'язаної з тепловим рухом атомів і молекул. Його називають **температурним**, оскільки середня енергія руху частинок пропорційна абсолютній температурі  $T$ , тобто  $\langle w \rangle \sim kT$ . При випромінюванні EMX температура тіл  $T$  зменшується. Тіла також можуть поглинати EMX, що призводить до підвищення температури.

**Люмінесценцією** називають випромінювання EMX за рахунок будь-яких інших джерел енергії, крім теплової. Розрізняють такі її види: хемілюмінесценція, електролюмінесценція, катодолюмінесценція, фотолюмінесценція, біолюмінесценція [1].

Теплове випромінювання має такі особливості:

- 1) воно існує за будь-якої температури, причому при її зменшенні його інтенсивність стає меншою;
- 2) це єдиний вид випромінювання, що може перебувати в стані **рівноваги** з випромінюючими тілами. Якщо рівновага порушується, наприклад, тіло випромінює більше енергії, ніж поглинає, то його внутрішня енергія зменшується, температура знижується, а це в свою чергу спричиняє зменшення випромінюваної енергії. Цей процес триватиме, поки кількість поглиненої і випроміненої

енергії не зрівняється. Якщо порушення рівноваги відбудеться в протилежний бік, тіло почне більше випромінювати, і знову настане рівновага. Температурою випромінювання  $T$  називають температуру тіла, з яким воно знаходиться в стані рівноваги;

- 3) рівноважне теплове випромінювання є **однорідним** (об'ємна густина енергії  $w = \text{const}$ ), **ізотропним** (всі напрямки поширення рівноймовірні) і **неполяризованим**.

• Розглянемо кількісні характеристики випромінювання і поглинання енергії ЕМХ тілами. Розрізняють **інтегральні** (загальні по всіх довжинах хвиль  $\lambda$ ) та **спектральні** характеристики.

Інтегральні характеристики:

- **потік енергії випромінювання** – це кількість енергії, що випромінюється тілом з усієї його поверхні за одиницю часу, тобто

$$\Phi = \frac{dW}{dt}, \quad (Bm); \quad (1-1)$$

- **загальна випромінювальна здатність** (енергетична світність) - це кількість енергії, що випромінюється з одиниці поверхні тіла за одиницю часу, тобто

$$R = \frac{dW}{dt \cdot dS} = \frac{d\Phi}{dS}, \quad \left( \frac{Bm}{m^2} \right); \quad (1-2)$$

- **загальна поглинальна здатність** – відношення поглиненого потоку енергії до повного потоку, що падає на тіло, тобто

$$A = \frac{\Phi_{\text{погл}}}{\Phi_{\text{пад}}}. \quad (1-3)$$

Спектральні характеристики:

- **спектральна випромінювальна здатність** – кількість енергії, що випромінюється з одиниці поверхні тіла за одиницю часу в одиничному інтервалі довжин хвиль або частот (рис.1), тобто

$$r_{l,T} = \frac{d\Phi_l}{dS \cdot dI} = \frac{dR_l}{dI}, \left( \frac{Bm}{m^3} \right); \quad (1-4)$$

- **спектральна поглинальна здатність** – відношення поглинутого потоку енергії до падаючого в одному й тому ж інтервалі довжин хвиль (або частот), тобто

$$a_{l,T} = \frac{d\Phi_l^{погл}}{d\Phi_l^{пад}}. \quad (1-5)$$

Спектральні характеристики  $r_{l,T}$  та  $a_{l,T}$  в загальному випадку залежать від довжини хвилі  $l$  (або частоти  $\omega$ ), темпера-

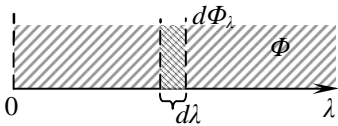


Рис.1

тури  $T$ , хімічного складу тіл та стану їхньої поверхні. Зв'язок між спектральною і загальною випромінювальними здатностями можна одержати із співвідношення (1-4):

$$R_T = \int_0^{\infty} r(l, T) \cdot dl. \quad (1-6)$$

Зауважимо, що загальна випромінювальна здатність  $R_T$  також залежить від температури, хімічної природи тіл та стану їхньої поверхні.

## § 1.2. Абсолютно чорне тіло. Закон Кірхгофа

•Відповідно до означення спектральної поглинальної здатності (1-5) ця фізична величина не перевищує одиницю, тобто  $a_{l,T} \leq 1$ . В теорії рівноважного теплового випромінювання важливу роль відіграє поняття так званого **абсолютно чорного тіла**. *Абсолютно чорним називається тіло, яке повністю поглинає все падаюче на нього випромінювання на всіх довжинах хвиль і за будь-яких температур.* Це означає, що згідно з (1-5) його поглинальна здатність тотожна одиниці,

тобто  $a_{l,T}^{\text{чорн}} \equiv 1$ . Сірим називається тіло, для якого поглинальна здатність однакова для всіх довжин хвиль і менша одиниці:  $a_{l,T}^c \equiv a_T = \text{const} < 1$ . Абсолютно чорних тіл у природі немає, це певна фізична абстракція. Тіла, вкриті шаром сажі або платинової черні, мають поглинальну здатність близьку до одиниці тільки в обмеженому діапазоні довжин хвиль. Найкращою моделлю абсолютно чорного тіла може

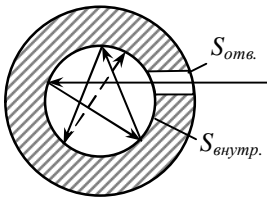


Рис.2

слугувати **отвір** у стінці непрозорої замкнутої порожнини (рис.2). Промені, що проникають у порожнину, в результаті багаторазового відбиття повністю поглинаються. Модель є тим ближче до абсолютно чорного тіла, чим більше відношення площ  $S_{\text{внутр}} / S_{\text{отв}}$ . Прикладами подібної моделі можуть бути вікна будинків, зіниці очей, печери й т. п.

•Між випромінювальною та поглинальною здатностями будь-якого тіла існує зв'язок. Розглянемо замкнуту порожнину, стінки якої підтримуються при постійній температурі й з якої видалене повітря. Помістимо в неї кілька різних за своєю природою тіл (рис.3).

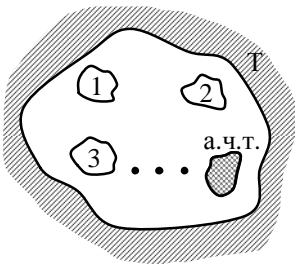


Рис.3

В результаті теплообміну між тілами й оболонкою порожнини вся система прийде в стан теплової рівноваги, всі тіла матимуть однакову температуру  $T$ . Це означає, що кожне тіло в будь-якому діапазоні довжин хвиль випромінює таку ж саму енергію, що й поглинає. Отже, тіла з більшою випромінювальною здатністю повинні мати

більшу поглинальну здатність. Звідси витікає, що для всіх тіл системи відношення випромінювальних здатностей до поглинальних є однаковими, тобто

$$\left( \frac{r_{l,T}}{a_{l,T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{l,T}}{a_{l,T}} \right)_2 = \left( \frac{r_{l,T}}{a_{l,T}} \right)_3 = \dots \quad (1-7)$$

Ця обставина формулюється у вигляді **закону Кірхгофа** (1895 р.): *відношення спектральної випромінювальної здатності до спектральної поглинальної здатності не залежить від природи тіла, воно є для всіх тіл універсальною функцією довжини хвилі (або частоти) і температури:*

$$\frac{r_{l,T}}{a_{l,T}} = j(l, T). \quad (1-8)$$

Із закону Кірхгофа маємо такі наслідки:

- оскільки для абсолютно чорного тіла  $a_{l,T}^{чорн} \equiv 1$ , то з (1-8) витікає, що  $r_{l,T}^{чорн} = j(l, T)$ , тобто універсальна функція Кірхгофа є не що інше, як спектральна випромінювальна здатність абсолютно чорного тіла;
- оскільки для реальних тіл  $a_{l,T} < 1$ , то їх випромінювальна здатність є меншою, ніж абсолютно чорних тіл;
- якщо тіло не поглинає ЕМХ якоїсь довжини  $l$ , тобто для них  $a_{l,T} = 0$ , то воно їх і не випромінює.

### § 1.3. Закони випромінювання абсолютно чорного тіла

•Після встановлення закону Кірхгофа постала першочергова задача – знайти аналітичний вигляд універсальної функції Кірхгофа  $j(l, T)$ , тобто залежність спектральної випромінювальної здатності абсолютно чорного тіла від довжини хвилі (або частоти) і температури.

Розподіл енергії в спектрі абсолютно чорного тіла був одержаний експериментально в кінці XIX століття. Як абсо-

лютно чорне тіло використовувався отвір у порожнині, стінки якої мали температуру  $T$ . Випромінювання, що виходило з отвору, розкладалось у спектр за допомогою дифракційної решітки, а інтенсивність його на різних ділянках спектра вимірювалась за допомогою болометра (рис.4).Прин-

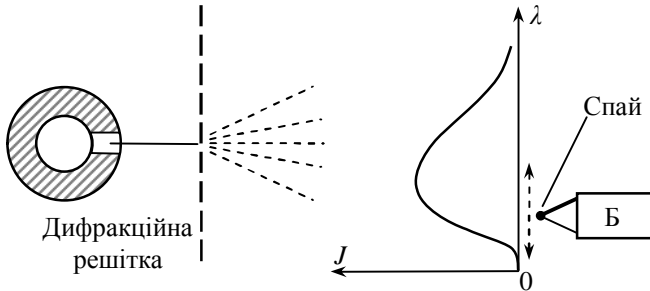


Рис.4

цип дії болометра базується на явищі термо-е.р.с.: якщо спаї двох різних металів мають різну температуру, то в колі виникає е.р.с.  $E_T = a \cdot (T_2 - T_1)$ . В болометрі зачорнена поверхня спаю нагрівається на різних ділянках спектра до певних значень  $T_2$ , а інший спай залишається при незмінній температурі  $T_1$ .

•З експериментальних графіків (рис.5) випливає, що спектр випромінювання абсолютно чорного тіла суцільний, має чітко виражений максимум і сильно залежить від температури. Площа під кожною кривою згідно з формулою (1-6) відповідає загальній випромінювальній здатності  $R_T^*$  абсолютно чорного тіла при даній температурі.

Вивчення експериментальних результатів дозволило встановити деякі співвідношення у випромінюванні абсолютно чорного тіла [1, 2]. Так, у 1879р. Д.Стефан експериментально, а в 1884 р. Л. Больцман теоретично на підставі законів термодинаміки встановили зв'язок між загальною випромінюва-

вальною здатністю  $R_T^*$  та абсолютною температурою  $T$ .  
**Закон Стефана – Больцмана:** *повна випромінювальна здатність абсолютно чорного тіла пропорційна четвертому степеню температури, тобто*

$$R^* = S \cdot T^4, \quad (1-9)$$

де  $S = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{Вт}{м^2 \cdot K^4}$  - стала Стефана-Больцмана.

У 1893 р. В. Він встановив закони, що визначають положення максимуму випромінювальної здатності абсолютно чорного тіла. **Закон зміщення Віна** (або 1-й закон Віна): *довжина хвилі, що відповідає максимуму спектральної випромінювальної здатності абсолютно чорного тіла, обернено пропорційна його абсолютній температурі, тобто*

$$\lambda_m = \frac{b}{T}, \quad (1-10)$$

де  $b = 2,9 \cdot 10^{-3} м \cdot K$  - стала Віна.

Закон зміщення Віна можна спостерігати, наприклад, при нагріванні металу: при збільшенні температури довжина хвилі, на яку припадає максимум випромінювання, зменшується, і світіння від темно-червоного переходить у фіолетове.

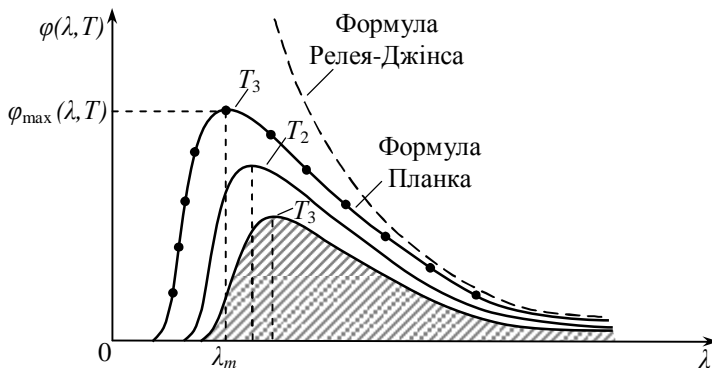


Рис.5



Максимальне значення спектральної випромінювальної здатності  $j(I, T)$  визначає **2-й закон Віна**: *максимальне значення спектральної випромінювальної здатності абсолютно чорного тіла пропорційне п'ятому степеню абсолютної температури*, тобто

$$j_{\max}(I, T) = C_{\epsilon} \cdot T^5, \quad (1-11)$$

де  $C_{\epsilon} = 1,3 \cdot 10^{-5} \frac{Вт}{м^3 \cdot К^5}$  - константа в цьому законі.

Закони випромінювання абсолютно чорного тіла використовуються в інфрачервоній локації, приладах нічного бачення, в системах автоматики, при визначенні температури тіл на відстані, при вивченні космічних об'єктів і т.ін.

#### § 1.4. “Ультрафіолетова катастрофа”. Формула Планка

• Закони Стефана-Больцмана і Віна є частковими законами випромінювання абсолютно чорного тіла, оскільки вони не дають загальної картини розподілу енергії випромінювання за довжинами хвиль при різних температурах. В кінці XIX ст. була зроблена низка спроб теоретично на підставі уявлень **класичної фізики** знайти закон розподілу енергії в спектрі випромінювання абсолютно чорного тіла, тобто одержати аналітичний вигляд універсальної функції Кірхгофа. Так, Дж. Релей і Дж. Джінс, розглядаючи рівноважне теплове випромінювання у порожнині як сукупність стоячих хвиль різних частот ( або довжин хвиль  $\lambda$  ) і довільних орієнтацій площин поляризації, припустили, що:

- в тілах атоми-осцилятори **неперервно** випромінюють електромагнітні хвилі різних частот;
- на кожне електромагнітне коливання припадає **в середньому енергія  $kT$**  ( по  $1/2 kT$  на електричну і магнітну складові ЕМХ ), оскільки на коливальну ступінь вільності за класичною статистикою припадає середня енергія  $kT$  [1, 2].

**Формула Релея-Джінса** (1900 р.) має такий вигляд:

$$j_{\text{Р-Дж}}(I, T) = \frac{2p \cdot c}{I^4} \cdot kT, \quad (1-12)$$

де  $c$  – швидкість світла,  $k$  – стала Больцмана.

Формула Релея-Джінса добре описує розподіл енергії у довгохвильовій частині спектра випромінювання і дає повну розбіжність з експериментальною кривою в короткохвильовій частині (див. рис.5). Крім того, повна випромінювальна здатність, обчислена за цією формулою, стає нескінченною величиною, тобто

$$R^*(T) = \int_0^{\infty} \frac{2p \cdot c}{I^4} \cdot kT \cdot dI = \infty, \quad (1-13)$$

що суперечить закону Стефана-Больцмана. Така істотна розбіжність теоретичних висновків класичної фізики й експериментальних результатів для теплового випромінювання одержала назву **“ультрафіолетової катастрофи”**.

•Труднощі класичної фізики призвели до необхідності перегляду уявлень про природу електромагнітного випромінювання.

Ще 1890 р. М. Планк, аналізуючи експериментальні результати, **емпірично** знайшов правильний вигляд функції Кірхгофа. Для цього треба було вважати, що атоми-осцилятори випромінюють ЕМХ на частоті  $n$  з середньою енергією

$$\langle w_n \rangle \sim \frac{n}{e^{an/kT} - 1}. \quad (1-14)$$

Згідно з цією формулою середня енергія випромінювання атома-осцилятора  $\langle w_n \rangle$  буде зменшуватись як в області великих частот  $n$  (малих  $I$ ), так і в області малих  $n$  (великих  $I$ ). У 1900 р. М. Планк остаточно сформулював свою теорію теплового випромінювання. Основні її положення такі:

- атоми тіла є лінійними гармонічними осциляторами з будь-якими частотами  $n$  ;
- енергія атома-осцилятора може змінюватись порціями (**квантами**), енергія яких пропорційна частоті  $n$  , тобто

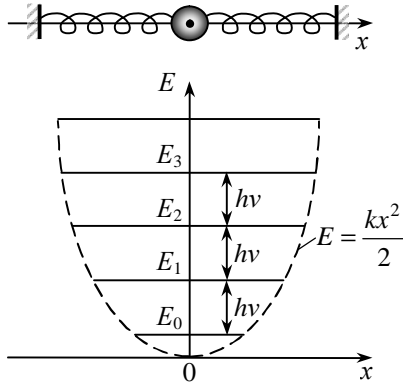
$$e = h \cdot n \quad \text{або} \quad e = \mathbf{h} \cdot w , \quad (1-15)$$

де  $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$  - стала Планка,  $w$  - циклічна час-

тота,  $\mathbf{h} = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$  - стала Планка з рисочкою.

В цьому полягає **квантова гіпотеза** Планка.

Таким чином, атом-осцилятор представляється як коли-  
вальна система з дискретними дозволеними енергетичними  
станами, розташованими на  
однакових відстанях  $e = h \cdot n$   
(рис.6). При переходах з ви-  
щого рівня на нижчий ви-  
промінюється квант з енер-  
гією  $e = h \cdot n$  . Тоді на частоті



$n$  енергія випромінювання  
буде дорівнювати  $E_n = nh\nu$ ,  
де  $n$  – кількість квантів даної  
частоти. З розподілу Больц-  
мана ймовірність перебуван-  
ня атома в стані з енергією  
 $E_n$  визначається як

Рис.6

$$P_n = C \cdot e^{-E_n / kT} ,$$

де  $C$  – нормувальний коефіцієнт. Отже, ймовірність  $P_n$  станів  
з більшою енергією зменшується за експоненціальним зако-  
ном. Для середньої енергії осцилятора з частотою  $n$  одер-  
жана така формула [1]:

$$\langle w_n \rangle = \frac{hn}{e^{hn/kT} - 1} . \quad (1-16)$$

Використовуючи зв'язок  $n = c / \lambda$  для середньої енергії осцилятора на довжині хвилі  $\lambda$ , одержимо вираз

$$\langle w_{\lambda} \rangle = \frac{hc}{\lambda} \cdot \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (1-17)$$

замість величини  $kT$ , який давала класична фізика. Підставляючи в (1-13) замість  $kT$  середню енергію у вигляді (1-17), одержуємо для функції Кірхгофа вираз

$$j(\lambda, T) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}. \quad (1-18)$$

Цей вираз називають **формулою Планка**. Вона повністю відповідає експериментальним результатам для рівноважного теплового випромінювання (див. рис.5). Як наслідок, з неї витікають закони Стефана-Больцмана і Віна, а також правильні значення констант у цих законах. Крім того, в області великих довжин хвиль  $\lambda$ , тобто малих частот  $n$ , формула Планка (1-18) збігається з формулою Релея-Джінса (1-12). Дійсно, коли  $hc/\lambda kT \ll 1$ , можна скористатися наближеною формулою

$$e^{hc/\lambda kT} \approx 1 + \frac{hc}{\lambda kT}. \quad (1-19)$$

Підставляючи (1-19) в (1-18), одержуємо формулу Релея-Джінса (1-12). Такий перехід від квантової формули до класичної свідчить про те, що в області великих  $\lambda$ , тобто малих частот  $n$ , енергія квантів є малою, квантування енергії випромінювання практично не помітне, тому в цій області можна оперувати поняттями неперервного випромінювання.

## § 1.5. Зовнішній фотоэффект

•Квантова гіпотеза Планка одержала свій подальший розвиток при вивченні та поясненні такого явища, як **зовнішній фотоэффект**. Суть цього явища полягає у *випусканні речовиною електронів під дією світла*. Явище зовнішнього фото-

ефекту відкрив Г. Герц 1887 р. і дослідив російський вчений О.Г.Столетов.

Спрощена схема установки для дослідження зовнішнього фотоэффекту представлена на рис.7. Світло крізь кварцове віконце, яке пропускає ультрафіолетові промені, проходить у вакуумну трубку і падає на катод К, покритий досліджуваным металом. Величину й полярність напруги між катодом К й анодом А можна міняти за допомогою реостата R. Гальванометр Г і вольтметр В використовуються для вимірювання електричного струму та напруги відповідно.

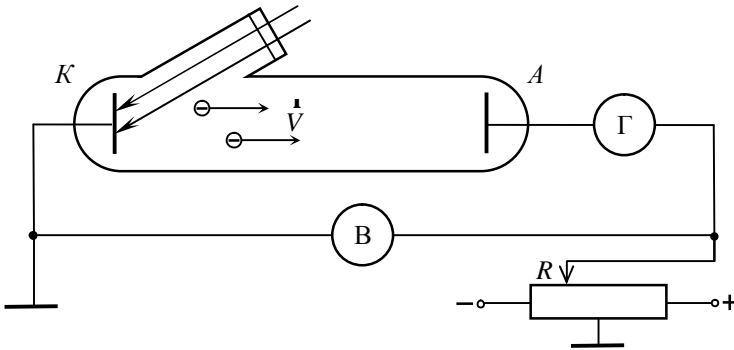


Рис.7

Вольт-амперні характеристики для установки (рис.7), тобто графіки залежності фотоструму від напруги між електродами, зображені на рис.8. Представлені характеристики

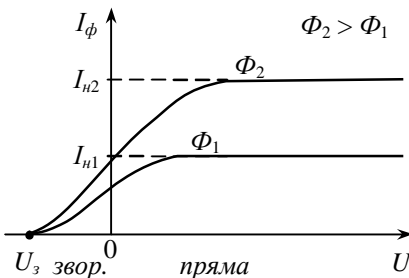


Рис.8

відповідають опроміненню світлом однакової частоти, але різного світлового потоку  $\Phi$ . Із графіків видно, що при напрузі  $U=0$  між катодом К і анодом А фотострум  $I_\phi$  не дорівнює нулю. Це свідчить про

те, що фотоелектрони, які вилітають із катода, мають певну швидкість, а отже, й кінетичну енергію, так що можуть долетіти до анода без прикладення електричного поля. При збільшенні прямої напруги фотострум зростає плавно, що свідчить про неоднаковість початкових швидкостей фотоелектронів, і зрештою, досягає максимального значення  $I_n$ , яке називається струмом насичення. Він настає тоді, коли всі випущені з катода фотоелектрони досягають анода, тобто

$$I_n = e \cdot n, \quad (1-20)$$

де  $e$  – заряд електрона,  $n$  – кількість електронів, вибитих з катода за одиницю часу.

Якщо прикладати зворотню напругу, фотострум зменшується і за певної напруги  $U_z$  дорівнює нулю. Величина затримуючої напруги зв'язана з максимальною швидкістю  $V_{\max}$  фотоелектронів так:

$$\frac{mV_{\max}^2}{2} = eU_z, \quad (1-21)$$

де  $m$  – маса електрона.

• На підставі експериментальних результатів були встановлені такі **закони зовнішнього фото ефекту** [1,2,3,4].

1. *Фотострум насичення прямо пропорційний світловому потоку, що падає на катод:*

$$I_n = k \cdot \Phi, \quad (1-22)$$

де  $k$  – коефіцієнт пропорційності, що називається фоточутливістю матеріалу катода. Цей закон одержав назву **закону Столетова**.

2. *Максимальна початкова швидкість фотоелектронів  $V_{\max}$ , а значить, і затримуюча напруга  $U_z$ , залежить від частоти падаючого світла  $\nu$  і не залежить від його інтенсивності.*

3. *Для кожного металу існує мінімальна частота світла  $\nu_0$  (або максимальна довжина хвилі  $\lambda_0$ ), при якій ще відбува-*

ється викидання електронів. Величина  $n_0$  (або  $I_0$ ) називається **червоною межею фотоефекту**, вона залежить від природи металу.

Дослід також показує, що фотоефект практично є безінерційним, тобто час затримки вильоту електронів після освітлення катода становить  $\sim 10^{-9} \text{ с}$ .

В рамках класичної електромагнітної теорії світла виявилось неможливим пояснити другий і третій закони зовнішнього фотоефекту. Дійсно, згідно з хвильовою теорією світло будь-якої частоти, але достатньо великої інтенсивності при взаємодії з електронами речовини повинно викидати їх, надаючи їм швидкість залежно від переданої електронам енергії. Такі ж самі міркування теж не можуть пояснити існування червоної межі фотоефекту.

•Труднощі, що виникли при поясненні законів зовнішнього фотоефекту, привели А.Ейнштейна в 1905 р. до створення квантової теорії світла. Він, розвиваючи ідеї М.Планка, дійшов висновку, що світло не тільки випромінюється, але також поширюється в просторі і поглинається окремими порціями – квантами електромагнітного випромінювання, енергія яких визначається за формулою (1-15). Ейнштейн показав, що зовнішній фотоефект зводиться до взаємодії світлових квантів з електронами речовини. При поглинанні світлового кванта його енергія цілком передається одному електрону, яка далі витрачається ним на виконання **роботи виходу  $A$**  з речовини, а решта залишається у вигляді кінетичної енергії. Закон збереження енергії при такій взаємодії виражається як

$$h\nu = A + \frac{mV_{\text{max}}^2}{2} . \quad (1-23)$$

Цей вираз одержав назву **рівняння Ейнштейна** для зовнішнього фотоефекту. На його підставі легко пояснюються всі закони фотоефекту.

1. Світловий потік  $\Phi$  визначається кількістю квантів світла,

що падають на поверхню катода за одиницю часу. Один квант може вибити один електрон. Чим більший світловий потік  $\Phi$ , тим більше вибивається фотоелектронів  $n$ , отже, й зростатиме фотострум насичення  $I_n$ , що відповідає закону Столетова (1-22).

- Оскільки електрон одержує енергію  $hn$ , то за будь-якої інтенсивності світла максимальна швидкість  $V_{\max}$  залежить тільки від частоти  $n$ . Підставляючи (1-21) в (1-23), одержимо лінійну залежність  $U_s$  від  $n$

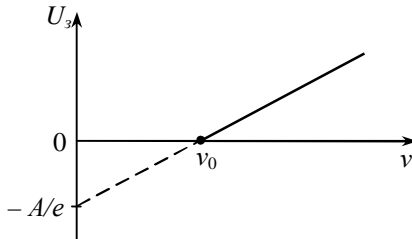


Рис.9

$$U_s = \frac{h}{e}n - \frac{A}{e}, \quad (1-24)$$

графік якої представлений на рис. 9. При частотах світла  $n < n_0$  графік зображений пунктиром, тому що на цих частотах фотоефект не йде.

- Зовнішній фотоефект може відбуватись тільки за умови, коли енергія кванта не менше роботи виходу, тобто  $hn \geq A$ . Звідси частота, що відповідає червоній межі фотоефекту, визначатиметься як

$$n_0 = \frac{A}{h}. \quad (1-25)$$

При частотах  $n < n_0$  кванти світла мають меншу енергію, ніж робота виходу електрона з металу, тому фотоефекту не буде.

## § 1.6. Гальмівне рентгенівське випромінювання

• У 1895р. В. Рентген відкрив випромінювання, яке одержало назву рентгенівського (в зарубіжній літературі – X-rays,



тобто “ікс-промені”). Як з’ясувалось згодом, це випромінювання являє собою електромагнітні хвилі з дуже короткими довжинами  $\lambda \sim 10^{-12} \dots 10^{-8} \text{ м}$ . Випромінювання, яке одержують в рентгенівських трубках (рис.10) в результаті гальмування електронів, називається **гальмівним рентгенівським випромінюванням**. У вакуумному балоні розміщені на певній відстані катод К і анод (або антикатод) А, між якими прикладена значна напруга  $U \sim 10 \text{ кВ}$ . Термоелектрони, що вилітають з катода, розганяються електричним полем і, вдаряючись у поверхню анода А, гальмуються, внаслідок чого й виникає рентгенівське випромінювання. При гальмуванні електронів на випромінювання йде всього 1...2% їхньої енергії, решта виділяється у вигляді сильного нагрівання антикатада. Спектр гальмівного рентгенівського випромінювання є суцільним і має чітко виражену межу  $\lambda_{\min}$ , яка зміщується в бік коротких хвиль при зростанні напруги  $U$  (рис.11). Залежність інтенсивності випромінювання  $J$  від  $\lambda$  має такий вигляд [5]:

$$J = \frac{B}{\lambda_{\min}^3} (\lambda - \lambda_{\min}), \quad (1-26)$$

де  $B$  – постійна величина.

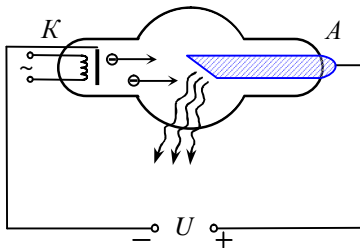


Рис.10

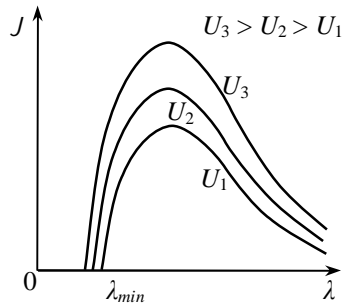


Рис.11

• Існування короткохвильової межі  $\lambda_{\min}$  неперервного

рентгенівського спектра не можна пояснити на підставі класичних уявлень про природу електромагнітного випромінювання. Дослід показав, що  $I_{\min}$  є обернено пропорційна кінетичній енергії електронів, які зумовлюють гальмівне рентгенівське випромінювання.

Така особливість гальмівного рентгенівського спектра дуже просто пояснюється на основі квантової теорії електромагнітного випромінювання. При гальмуванні кожний електрон породжує квант електромагнітного випромінювання. Якщо вся кінетична енергія електрона перейде в енергію кванта, то це буде квант з максимальною частотою (або мінімальною довжиною хвилі), тобто

$$\frac{mV^2}{2} = eU = hn_{\max} = \frac{hc}{I_{\min}}, \quad (1-27)$$

звідки для  $I_{\min}$  матимемо

$$I_{\min} = \frac{hc}{eU}. \quad (1-28)$$

Якщо ж частина енергії електрона піде на нагрівання антикатада, то утворюється квант з меншою енергією, а значить, і з меншою частотою  $n < n_{\max}$ . Оскільки процес гальмування має випадковий характер, то розподіл енергії між утвореним квантом і нагріванням буде довільним, а спектр – суцільним.

## § 1.7. Фотони. Корпускулярно-хвильовий дуалізм світла

•Розвиваючи гіпотезу Планка про квантовий характер теплового випромінювання, А.Ейнштейн дійшов висновку, що електромагнітне випромінювання, зокрема світло, не тільки **випромінюється**, але й **поширюється** в просторі та **поглинається** речовиною у вигляді окремих порцій енергії – **квантів**, які поводять себе в цих процесах як єдине ціле. З 1926р. квант енергії електромагнітного випромінювання для

оптичного діапазону одержав назву **фотон**. Фотонна теорія світла знайшла блискуче підтвердження в цілому ряді цікавих дослідів, проведених Йоффе, Добронравовим, Вавіловим, в досліді Боте та інших експериментах [1, 2, 3, 4]. Сучасна техніка експерименту дозволяє реєструвати навіть окремі фотони.

Отже, світло являє собою потік корпускул (тобто частинок) – **фотонів**. Фотон має енергію

$$e_{\phi} = h\nu, \quad (1-29)$$

а також інші характеристики, притаманні частинкам. Згідно з висновками спеціальної теорії відносності із формули зв'язку енергії й маси для маси фотона одержимо

$$m_{\phi} = \frac{h\nu}{c^2}, \quad (1-30)$$

де  $c$  – швидкість світла у вакуумі. Оскільки фотони поширюються у вакуумі з швидкістю  $c$ , то з релятивістської формули

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (1-31)$$

випливає, що маса спокою фотона  $m_0 = 0$ , інакше при  $V = c$  маса фотона дорівнювала б нескінченності. Отже, фотон – особлива частинка, вона має нульову масу спокою і може існувати, рухаючись у вакуумі тільки з швидкістю  $c$ .

Також фотону, як частинці, притаманний імпульс

$$p_{\phi} = m_{\phi}c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k, \quad (1-32)$$

або у векторному вигляді

$$\mathbf{p}_{\phi} = \hbar \mathbf{k}, \quad (1-33)$$

де  $\mathbf{k}$  – хвильовий вектор, який чисельно дорівнює  $2\pi/\lambda$ .

• Електромагнітне випромінювання, зокрема світло, падаючи на поверхню тіл, здійснює тиск. Вперше експериментально світловий тиск дослідив російський фізик П.М.Лебедев у 1900 р. Розглядаючи світло як електромагнітну хвилю, можна

одержати для тиску світла такий вираз:

$$P = w(1 + r) \cos i, \quad (1-34)$$

де  $w$  – об’ємна густина енергії електромагнітної хвилі, яка може бути виражена через інтенсивність хвилі як  $w = J/c$ ,  $r$  – коефіцієнт відбивання світла,  $i$  – кут падіння світла на поверхню.

У квантовій теорії тиск світла зумовлений частковим поглинанням і відбиванням фотонів з імпульсом (1-32). Враховуючи, що для поглинаючої поверхні  $r = 0$ , а для дзеркальної -  $r = 1$ , можна одержати [2] вираз

$$P = \frac{N_0 \cdot h\nu}{c} (1 + r) \cos i, \quad (1-35)$$

де  $N_0$  – кількість фотонів, що падає на одиницю поверхні за одиницю часу. Формули (1-34) і (1-35) повністю узгоджуються між собою, якщо взяти до уваги зв’язок інтенсивності з енергією, яку переносять фотони, тобто  $J = N_0 \cdot h\nu$ . Це свідчить про справедливості обох підходів до пояснення тиску світла, а також про глибинний зв’язок між хвильовими і корпускулярними властивостями світла.

•Отже, існують явища, в яких світло (електромагнітне випромінювання) поводить себе як потік частинок – фотонів (пояснення теплового випромінювання, зовнішній фото-ефект, гальмівне рентгенівське випромінювання). Однак інші явища - інтерференція, дифракція, поляризація - свідчать на користь хвильової природи світла. Інакше кажучи, світло виявляє **корпускулярно-хвильовий дуалізм**, тобто двоїсту природу. Як же поєднати в одному об’єкті такі протилежні і суперечливі властивості?

Фотони треба розглядати як особливі мікрооб’єкти, які поєднують одночасно корпускулярні і хвильові властивості (хвиля – частинка), проте не є ані частинкою, ані хвилею в звичному розумінні цих понять. Повністю безнадійною є спроба створити модель, яка об’єднувала б в одне ціле хвилю

й частинку. Суть складної картини мікросвіту не може бути відтворена ніякими хитромудрими моделями, запозиченими з макросвіту, її треба сприймати такою, яка не суперечить результатам дослідів. А досліди показують, що в області великих довжин хвиль  $I$  (тобто малих частот  $\nu$ ) світло виявляє в основному хвильові властивості, і навпаки, в області малих  $I$  (тобто великих  $\nu$ ) – корпускулярні.

Співвідношення між хвильовою й корпускулярною картинами можна дати на прикладі зв'язку інтенсивності електромагнітної хвилі з ймовірністю перебування фотонів у цій точці. Оскільки інтенсивність пропорційна квадрату амплітуди електричної складової  $J \sim E_m^2$ , то зв'язок з ймовірністю  $dP$  знайти фотон в об'ємі  $dV$  запишеться так:

$$dP = c \cdot E_m^2 dV, \quad (1-36)$$

де  $c$  - коефіцієнт пропорційності.

Відмітимо, що вирази (1-29), (1-30), (1-32) та (1-36), які одержані для світла (фотонів), є універсальними і знайшли широку інтерпретацію при створенні квантової механіки.

### § 1.8. Ефект Комптона

•Особливо виразно виявляються корпускулярні властивості електромагнітного випромінювання в ефекті Комптона (1923 р.). Досліджуючи розсіюння рентгенівського проміння різними речовинами, Комптон установив, що в розсіяному промінні поряд з первісною довжиною хвилі  $I$  є проміння з більшою довжиною хвилі  $I' > I$ . З'ясувалось, що різниця  $\Delta I = I' - I$  не залежить від природи розсіювальної речовини, але залежить тільки від кута розсіювання  $j$ . Експериментально була встановлена така залежність:

$$\Delta I = I_c (1 - \cos j) = 2I_0 \sin^2 \frac{j}{2}, \quad (1-37)$$

де  $I_c = 0,0242 \text{ А}$  – деяка константа.

Схема досліджу Комптона показана на рис.12. Вузький пучок монохроматичного рентгенівського випромінювання з довжиною хвилі  $\lambda$  проходив крізь діафрагми Д і падав на розсіювальну речовину РР. За допомогою рентгенівського

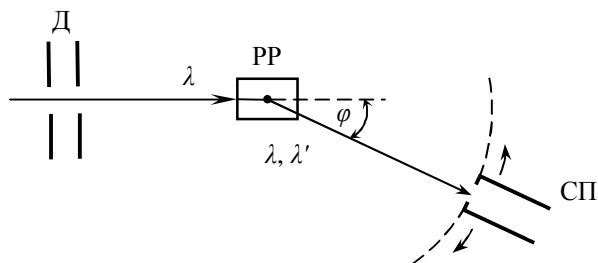


Рис.12

спектрометра СП досліджувалось розсіяне під різними кутами рентгенівське проміння, в якому були присутні крім довжин хвиль  $\lambda$  ще й хвилі більшої довжини  $\lambda'$

•Класична хвильова теорія електромагнітного випромінювання не змогла пояснити результати досліджу Комптона. Всі особливості цього досліджу, однак, легко пояснити на підставі квантової теорії. В ній розсіяння рентгенівського проміння розглядається як **процес пружного зіткнення** рентгенівських квантів з практично вільними електронами речовини (рис.13). Вільними можна вважати такі електрони, енергія зв'язку яких в атомі набагато менша енергії рентгенівського кванта. При

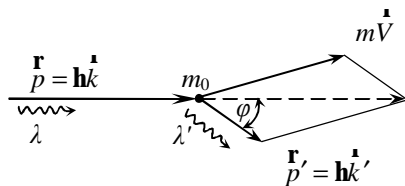


Рис.13

розсіянні квант передає частково енергію та імпульс одному з вільних електронів, тоді енергія кванта зменшиться залежно від кута розсіяння. Крім того, експериментально доведено, що розсіяний рентгенівський квант і електрон віддачі з'являються одночасно [2].

На підставі законів збереження енергії та імпульсу для пружного зіткнення маємо:

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2, \quad (1-38)$$

$$\mathbf{hk} = m\mathbf{V} + \mathbf{hk}', \quad (1-39)$$

де  $m_0$  - маса спокою електрона,  $m = m_0 / \sqrt{1 - V^2 / c^2}$  - релятивістська маса електрона віддачі,  $V$  - швидкість електрона віддачі,  $\nu$  та  $\nu'$  - частоти падаючого та розсіяного квантів,  $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{n}$  та  $\mathbf{k}' = \frac{2\pi}{\lambda'} \mathbf{n}'$  - хвильові вектори падаючого та розсіяного квантів,  $\mathbf{n}$  та  $\mathbf{n}'$  - орти напрямків поширення квантів. Розв'язання [1,2,4] системи рівнянь (1-38) та (1-39) для різниці довжин хвиль дає такий результат:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos\theta). \quad (1-40)$$

Величина  $\lambda_C = \frac{h}{m_0c}$  - називається комптонівською довжиною хвилі електрона і при підстановці відповідних значень дає  $0,0242 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , що збігається з емпіричним значенням  $\lambda_C$  у виразі (1-37).

Якщо розсіяння відбувається на сильно зв'язаному електроні (це – внутрішні електрони в атомі), то фактично відбувається взаємодія кванта з цілим атомом, маса якого значно більше маси електрона. Тоді в формулі (1-40) замість  $m_0$  треба взяти масу атома  $M_a \gg m_0$ , і величина  $\Delta\lambda$  буде дуже мала, тобто розсіяні кванти матимуть практично незмінну довжину хвилі.

## Задачі

**1.1. Теплове випромінювання.** Потік енергії, що випромінюється крізь оглядове віконце плавильної печі,  $\Phi=54\text{Вт}$ . Знайти температуру печі, якщо площа отвору  $S=6\text{ см}^2$ , а також довжину хвилі, на яку припадає максимум випромінювальної здатності. Вважати, що віконце випромінює як абсолютно чорне тіло.

**Р о з в'я з а н н я.** За означенням повної випромінювальної здатності (1-2)  $R = \Phi / S$ . За законом Стефана-Больцмана (1-9) для абсолютно чорного тіла  $R^* = S \cdot T^4$ . Прирівнюючи ці величини, матимемо

$$T = \sqrt[4]{\frac{\Phi}{S \cdot S}}.$$

Із закону зміщення Віна (1-10) знайдемо довжину хвилі, на якій буде максимум випромінювання:  $I_m = b/T$ .

Виконаємо обчислення в СІ:

$$T = \sqrt[4]{\frac{54}{5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 6 \cdot 10^{-4}}} = \sqrt[4]{1,587 \cdot 10^{-12}} = 1,12 \cdot 10^3 \text{ К},$$

$$I_m = \frac{2,90 \cdot 10^{-3}}{1,12 \cdot 10^3} = 2,58 \cdot 10^{-6} \text{ м}.$$

**1.2.** Знайти зв'язок між спектральними випромінювальними здатностями, вираженими через довжину хвилі  $l$  і частоту  $w$ , тобто між  $r_l$  та  $r_w$ .

**Р о з в'я з а н н я.** За означенням (1-4) потік енергії, що випромінюється в інтервалі довжин хвиль  $dl$ , дорівнює  $r_l \cdot dl$ . Якщо взяти ділянку спектру  $dw$  таку, що відповідає інтервалу  $dl$ , то можна записати

$$r_l \cdot dl = r_w \cdot dw.$$

Із зв'язку  $l = 2\pi c/w$  знайдемо диференціал  $dl$ :



$dI = -\frac{2pc}{w^2} \cdot dw$ . Знак мінус у подальшому можна не враховувати. Підставляючи цей вираз у попереднє рівняння, одержимо:

$$r_w \cdot dw = r_l \cdot \frac{2pc}{w^2} \cdot dw,$$

$$\text{звідки } r_w = r_l \cdot \frac{2pc}{w^2} = r_l \cdot \frac{I^2}{2pc}.$$

**1.3. Фотон.** Знайти енергію й довжину хвилі фотона, що має такий самий імпульс, як електрон, швидкість якого дорівнює  $V = 10^6$  м/с.

Розв'язання. Імпульс електрона  $p_e = m_e \cdot V$ , імпульс фотона визначається за формулою (1-32). Тоді, прирівнявши  $p_e = p_\phi$ , одержимо  $m_e \cdot V = \frac{h}{l}$ , звідки

$$l = \frac{h}{m_e \cdot V}.$$

Енергію фотона знаходимо за формулою (1-29):

$$e = hn = \frac{h \cdot c}{l}.$$

Обчислюємо в СІ:

$$l = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^6} = 0,73 \cdot 10^{-9} \text{ м},$$

$$e = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{0,73 \cdot 10^{-9}} = 2,72 \cdot 10^3 \text{ Дж} = 1,7 \text{ кеВ}.$$

**1.4.** Яка частка енергії фотона витрачена на роботу виривання фотоелектрона, якщо червона межа фотоефекту дорівнює 3070 А, а затримуюча напруга становить 1 В?

Розв'язання. В задачі треба знайти відношення роботи виходу електрона  $A$  до повної енергії фотона  $hn$ , тобто  $h = A/hn$ . Роботу виходу знайдемо на підставі (1-25):

$A = hn_0 = \frac{hc}{l_0}$ . Повну енергію фотона знайдемо з рівняння

Ейнштейна (1-23) з урахуванням (1-21):  $hn = A + eU_3$ .

$$\text{Отже, } h = \frac{A}{A + eU_3} = \frac{1}{1 + eU_3 / A} = \frac{1}{1 + eU_3 l_0 / hc}.$$

Обчислюємо:

$$h = \frac{1}{1 + 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 1 \cdot 3,070 \cdot 10^{-7} / 6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8} =$$

$$= \frac{1}{1 + 0,25} = 0,8.$$

### Стислі висновки

1. Теплове випромінювання тіл за своєю природою є електромагнітним і відбувається за рахунок енергії теплового руху атомів і молекул. Теплове випромінювання є рівноважним.
2. Відношення випромінювальної і поглинальної здатності тіл при тепловій рівновазі не залежить від природи тіл і є універсальною функцією  $j(I, T)$ , яка представляє собою спектральну випромінювальну здатність абсолютно чорного тіла.
3. Аналітичний вигляд функції  $j(I, T)$  був одержаний Планком у припущенні квантового (дискретного) характеру випромінювання, що є абсолютно чужим поняттям класичної фізики. Енергія кванта пропорційна частоті випромінювання  $e = hn$ .
4. Зовнішній фотоефект полягає у вириванні електронів з твердих тіл під дією електромагнітного випромінювання з частотою, що перевищує частоту червоної межі, тобто  $n \geq n_0$ .
5. Закони зовнішнього фотоефекту не можна пояснити в

межах хвильової теорії світла. Всі закономірності фотоефекту легко пояснюються, якщо вважати, що електромагнітне випромінювання випускається, поширюється й поглинається у вигляді квантів з енергією  $\epsilon = h\nu$ . Рівняння А.Ейнштейна, що описує фотоефект, має вигляд:

$$h\nu = A + \frac{mV_{\max}^2}{2}.$$

6. Електромагнітне випромінювання, зокрема світло, має двоїсту корпускулярно-хвильову природу. Виявлення корпускулярних або хвильових властивостей здебільшого залежить від умов експерименту. Хвильова природа випромінювання підтверджується такими явищами, як поляризація, дифракція, інтерференція. Однак такі явища, як зовнішній фотоефект, комптон-ефект, закони теплового випромінювання можуть бути пояснені успішно тільки в квантовій теорії випромінювання. Більш різко корпускулярні властивості випромінювання виявляються при зростанні частоти  $\nu$ , а хвильові – навпаки, при зменшенні частоти.
7. Електромагнітне випромінювання має одночасно властивості неперервних хвиль і властивості дискретних квантів, тобто являють собою діалектичну єдність цих протилежних властивостей.

Марними є намагання створити на базі чуттєвого досвіду наочну модель об'єкта, що поєднує такі протилежні якості. Об'єктивність дуалізму фотонів свідчить про те, що закономірності мікросвіту зовсім несхожі на закони, що діють у макросвіті.

### *Питання для самоконтролю*

1. *Якою є природа теплового випромінювання? Які його основні властивості?*
2. *Що таке абсолютно чорне тіло?*

3. Який фізичний смисл має універсальна функція Кірхгофа?
4. В чому головна різниця підходів класичної фізики і теорії Планка при поясненні випромінювання абсолютно чорного тіла?
5. Записати і пояснити фізичний зміст рівняння Ейнштейна для фотоефекту.
6. Що розуміють під корпускулярно-хвильовим дуалізмом світла?
7. Чому в ефекті Комптона різниця довжин хвиль розсіяного і падаючого рентгенівського проміння залежить тільки від кута розсіяння?

## Глава 2. Хвильові властивості мікрочастинок

### § 2.1. Гіпотеза і формула де Бройля

Ідея корпускулярно-хвильового дуалізму світла виявилась дуже плідною і знайшла своє продовження для опису особливостей поведінки інших мікрооб'єктів.

• У 1924 р. французький фізик Луї де Бройль висунув гіпотезу, що **дуалізм** притаманний не тільки електромагнітному випромінюванню (світлу), але й **взагалі поширюється на всі мікрооб'єкти**. За його припущенням формули (1-29) та (1-32), які є справедливими для фотонів, мають більш загальний характер і можуть бути застосовані до будь-яких матеріальних об'єктів. Таким чином, з рухом будь-якої частинки пов'язаний хвильовий процес з довжиною хвилі

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mV}, \quad (2-1)$$

де  $p$ ,  $m$ ,  $V$  – імпульс, маса та швидкість частинки відповідно. В загальному випадку під  $m$  розуміють релятивістську масу частинки  $m = m_0 / \sqrt{1 - V^2 / c^2}$ . Вираз (2-1) одержав назву **формули де Бройля**.

Також, як і для фотонів, існує зв'язок між енергією частинки  $E$  та частотою дебройлівської хвилі  $n$ :

$$E = h \cdot n. \quad (2-2)$$

• Запропонувавши ідею про хвильовий процес, яким супроводжується рух частинок, де Бройль, однак, не дав відповідь на питання про природу цих хвиль (їх ще називають хвилями матерії). Він тільки підкреслив, що це – не звичайні матеріальні хвилі, що несуть енергію. Аналіз [3] хвиль де Бройля згідно з формулами (2-1) та (2-2) показує, що їх також не можна представляти у вигляді хвильового пакета, оскільки через сильну дисперсію (тобто залежність фазової швидкості від частоти) він практично миттєво “розповзається”.

Не розглядаючи поки що питання про природу хвиль де Бройля, запишемо математичний вираз для хвильового процесу, який супроводжує рух вільної частинки вздовж осі  $x$ . Це буде рівняння плоскої монохроматичної хвилі, яку в показниковій формі в квантовій фізиці записують так:

$$y(x, t) = A \cdot e^{-j(\omega t - kx)}. \quad (2-3)$$

Підставимо тепер в (2-3) вирази для циклічної частоти  $\omega$  та хвильового числа  $k$ , використовуючи формули (2-1) і (2-2),

$$\text{тобто } \omega = 2\pi\nu = \frac{E}{h/2\pi} = \frac{E}{h} \quad \text{та} \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h/2\pi}{\lambda/2\pi} = h \cdot k, \quad \text{звідки}$$

$$k = \frac{p}{h}. \quad \text{Тоді одержимо вираз так званої хвильової псі-функції}$$

для вільної частинки, що має енергію  $E$  та імпульс  $p$

$$y(x, t) = A e^{\frac{j}{h}(px - Et)}, \quad (2-4)$$

де  $A$  – амплітуда хвильової функції,  $j$  – уявна одиниця.

•З формули де Бройля (2-1) маємо, що зі зменшенням маси частинки  $m$  у неї більш помітно повинні проявлятися хвильові властивості. Зробимо оцінку дебройлівських довжин хвиль для макрочастинки з масою  $1g$  та мікрочастинки (електрон).

1. Якщо частинка має масу  $m = 10^{-3} \text{ кг}$  і швидкість  $V = 10^3 \text{ м/с}$ , то довжина хвилі де Бройля

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-3} \cdot 10^3} \sim 10^{-34} \text{ м}.$$

Щоб спостерігати хвильові властивості такої частинки (наприклад, дифракцію хвиль), потрібні перешкоди розміром  $\sim 10^{-34} \text{ м}$ , що набагато менше розмірів самих атомів ( $\sim 10^{-10} \text{ м}$ ). Зрозуміло, що нема ніякої можливості спостерігати хвильові властивості подібних частинок. Отже, поведінка *макрооб'єктів* описується законами класичної механіки, хвильові властивості практично ніяк не впли-

вають на їхній рух.

2. Електрон масою  $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$ , який летить з швидкістю  $V = 10^6 \text{ м/с}$ , має довжину хвилі де Бройля

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^6} \sim 10^{-9} \text{ м}.$$

Така довжина хвилі одного порядку з параметрами кристалічної решітки й, отже, можна очікувати прояв дифракції електронів на кристалах, тобто підтвердження хвильових властивостей *мікрооб'єктів*.

## § 2.2. Дифракція мікрочастинок

•Ідея де Бройля про хвильові властивості матерії здавалася дуже несподіваною. Навіть А.Ейнштейн у листі до М.Борна з приводу дисертації де Бройля писав так: "Прочитайте її! Хоч і здається, що її написав божевільний, написана вона солідно" [2].

У 1927 р. гіпотеза Луї де Бройля дістала своє експериментальне підтвердження в дослідях американських вчених К.Девіссона і Л.Джермера. Вони вивчали розсіяння пучка моноенергетичних електронів монокристалом нікелю на ус-

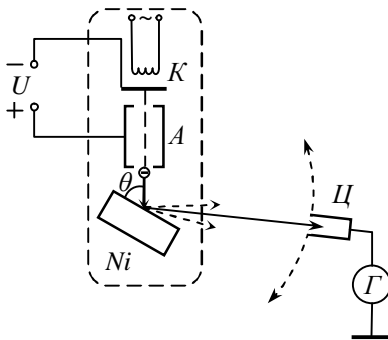


Рис.14

тановці, схема якої показана на рис.14. Пучок електронів в електронній гарматі, яка складається з катоду К з підігрівом та анода А, прискорюється напругою  $U$  і спрямовується на поверхню монокристала Ni під кутом  $\theta$ . Розсіяні електрони вловлювались циліндром Фарадея Ц, відтак стікаючи на землю через гальванометр Г. Інтен-

сивність розсіяного пучка визначалась за силою струму  $I$ . В ході дослідів можна було змінювати напругу  $U$  та кут  $q$ . Дослідження показали, що при незмінному куті ковзання  $q$  інтенсивність розсіяного електронного пучка, яка є пропор-

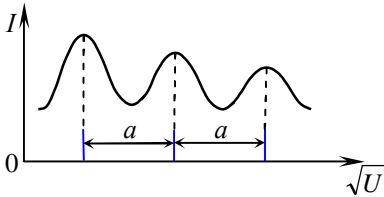


Рис.15

Результати дослідів Девіссона і Джермера можна легко пояснити на підставі гіпотези про хвильові властивості мікрочастинок. Оскільки кінетична енергія електрона виражається через імпульс його  $p$  і через напругу  $U$  рівністю

$$T = \frac{mV^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = eU,$$

то  $p = \sqrt{2meU}$ , звідки на підставі формули (2-1) маємо для дебройлівської довжини хвилі електрона

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{12,25}{\sqrt{U}}, (\text{\AA}). \quad (2-5)$$

Картина залежності інтенсивності розсіяного пучка електронів на рис. 15 дуже нагадує дифракцію рентгенівських променів на кристалах (рис.16).

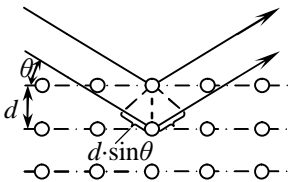


Рис.16

Отже, якщо пучку електронів притаманні хвильові властивості, то напрями для дифракційних максимумів повинні визначатися згідно з формулою Вульфа-Брегга

$$2d \cdot \sin q = n \cdot \lambda, \quad (2-6)$$

де  $d$  – період кристалічної решітки,  $n = 1, 2, 3, \dots$  - порядок максимуму.



Для напруги  $U = 54 \text{ В}$  підрахунок за формулою (2-5) дає значення  $I = 1,67 \text{ А}$ . За формулою (2-6) при  $n = 1$ ,  $q = 65^\circ$  та  $d = 0,91 \text{ А}$  (для нікелю) бреггівська довжина хвилі дорівнює  $1,65 \text{ А}$ . Як бачимо, результати майже збігаються. Незначна відмінність їх пояснюється заломленням дебройлівських хвиль [3].

• У 1928 р. П.С. Тартаковський в СРСР і незалежно від нього Д. Томсон в Англії спостерігали дифракцію при проходженні пучка електронів крізь тонкі ( $\sim 10^{-5} \text{ см}$ ) металічні пластинки полікристалічної структури (рис.17, а). Електрони,

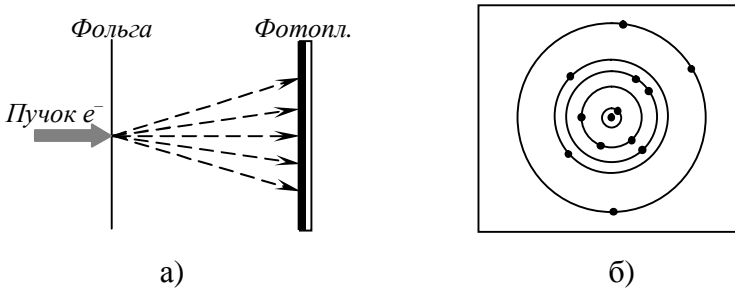


Рис.17

попадаючи на фотопластинку, викликають таку ж саму дію, як і світло, тобто після проявлення в місцях попадання буде почорніння. Виявилось, що одержані картини дифракції аналогічні картинам дифракції рентгенівських променів, тобто являють собою систему темних і світлих кілець (рис.17,б). Щоб переконатись, що на фотопластинку падають електрони, а не вторинне рентгенівське випромінювання, в просторі перед фотопластинкою створювали магнітне поле. Це призводило до зміщення й викривлення дифракційної картини, що пояснюється дією магнітного поля на рухомі заряджені частинки, якими є електрони. Розрахунок одержаних дифракційних картин для електронів також підтверджував справедливність формули де Бройля (2-1).

Для з'ясування питання, чи притаманні хвильові властивості кожному окремому електрону (для електронних пучків це вже було доведено), у 1949 р. у Москві під керівництвом В.А.Фабриканта був проведений дослід, в якому на металеву фольгу спрямовувався дуже слабкий пучок електронів, так що кожний електрон проходив поодиноці й окремо реєструвався фотопластинкою. Окремі електрони викликали почорніння на фотопластинці в різних місцях (рис.17,б), однак після тривалого часу проходження електронів створювалась така ж сама дифракційна картина, як і в досліді з електронним пучком. Таким чином, поодинокі електрони поцілювали тільки в “дозволені” місця на фотопластинці, а це означало, що кожний окремий електрон має хвильові властивості й дифрагує незалежно від інших електронів.

Крім електронів хвильові властивості виявляють й інші мікрооб'єкти, такі як протони, нейтрони, атоми, молекули. Однак при зростанні маси мікрооб'єктів їхні хвильові властивості стають менш помітними.

Хвильові властивості мікрочастинок (електронів і нейтронів) використовуються в електронографії та нейтронографії – методах структурного аналізу кристалічних речовин. Вони ґрунтуються на тому, що дифракційні ефекти спостерігаються лише за умови, що дебройлівська довжина хвилі співмірна з періодом кристалічної структури. Розшифровка дифракційних картин дозволяє встановити розташування атомів або молекул у поверхневих шарах твердих тіл (електронографія), а також дослідити будову більш глибоких шарів речовини (нейтронографія).

### § 2.3. Співвідношення невизначеностей

•В класичній механіці для опису руху частинки в просторі достатньо знати три координати  $(x, y, z)$  і три проекції імпульсу  $(p_x, p_y, p_z)$  в кожний момент часу  $t$ . Якщо відомі

сили, що діють на матеріальну точку, то на підставі другого закону Ньютона  $\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$  можна визначити **точні** значення координат та імпульсу в наступні моменти часу. В цьому полягає *принцип класичного детермінізму*, тобто принцип причинності у класичній механіці. Сукупність точних значень координат та імпульсу частинки утворює звичне в класичній фізиці поняття траєкторії руху.

Зовсім інакше вирішується питання опису поведінки **мікрооб'єктів**. Справа в тому, що наявність у мікрочастинки хвильових властивостей не дозволяє одночасно вказати її точні значення координат й імпульсу, це можна зробити тільки в межах певних *невизначеностей*. Глибокий аналіз причин існування і зв'язку між невизначеностями фізичних величин для мікрочастинок провів В.Гейзенберг у 1927 р.

**Співвідношення невизначеностей**, строгий математичний вигляд яких одержав Гейзенберг, мають такий вигляд:

- для координат і відповідних проекцій імпульсу

$$\begin{aligned}\Delta x \cdot \Delta p_x &> \hbar/2, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &> \hbar/2, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &> \hbar/2;\end{aligned}\tag{2-7}$$

- для енергії й часу

$$\Delta E \cdot \Delta t > \hbar/2;\tag{2-8}$$

- для кута повороту навколо осі й відповідної проекції моменту імпульсу

$$\begin{aligned}\Delta j_x \cdot \Delta M_x &> \hbar/2, \\ \Delta j_y \cdot \Delta M_y &> \hbar/2, \\ \Delta j_z \cdot \Delta M_z &> \hbar/2.\end{aligned}\tag{2-9}$$

•Розглянемо фізичний зміст співвідношень невизначеностей [6]. У першому виразі співвідношень (2-7)  $\Delta x$  - невизначеність  $x$ -координати мікрооб'єкта,  $\Delta p_x$ -невизначеність  $x$ -проекції його імпульсу. Чим менше  $\Delta x$ , тим більше  $\Delta p_x$ , і

навпаки. Іноді це трактують так: неможливо виміряти координату й імпульс мікрооб'єкта з якою завгодно високою точністю одночасно; чим точніше виміряна координата, тим менш точно може бути виміряний імпульс. Таке розуміння є хибним, тому що воно передбачає, що насправді мали б бути точні значення цих параметрів, але сам процес вимірювань не є досконалим. Істинний зміст співвідношень (2-7) відображає той факт, що просто сам мікрооб'єкт через притаманні йому **хвильові властивості** не може одночасно мати і точну координату, і точну проекцію імпульсу. Співвідношення (2-7) встановлюють принципову межу невизначеностей, з якими стан мікрочастинки можна описувати на мові *класичної* фізики, тобто за допомогою координат й імпульсів.

Принцип невизначеностей накладає обмеження на одночасні точні значення не тільки координат й імпульсу, але й на інші зв'язані з ними фізичні величини – енергію й час (2-8), проекцію моменту імпульсу на вісь і кут повороту відносно цієї ж осі (2-9).

Співвідношення (2-8) встановлює зв'язок між точністю значення енергії  $\Delta E$  мікрочастинки в якомусь нестабільному стані та тривалістю часу  $\Delta t$  перебування в цьому стані. Зокрема, якщо стан стаціонарний, тобто  $\Delta t \rightarrow \infty$ , то  $\Delta E = 0$ , тобто енергія стану визначається точно.

Співвідношення невизначеностей (2-7) ... (2-9) треба розглядати по суті як закон, що визначає межу, до якої можна використовувати уявлення і характеристики класичної механіки для опису стану й поведінки частинки з двоїстою корпускулярно-хвильовою природою.

• Як ілюстрацію справедливості співвідношень (2-7) розглянемо проходження мікрочастинки крізь щілину шириною  $\Delta x$  в екрані, розташованому перпендикулярно напрямку її руху (рис.18) [1]. До проходження її крізь щілину проекція імпульсу на вісь  $x$  дорівнює нулю точно (за умовою досліду екран перпендикулярний до вектора  $\vec{p}$ ), так що  $\Delta p_x = 0$ . Проте

координата частинки  $x$  зовсім невідома, тобто  $\Delta x \rightarrow \infty$ . У момент проходження крізь щілину замість повної невизначеності координати з'являється невизначеність  $\Delta x$ , але це досягається ціною втрати точного значення  $p_x$ , оскільки через

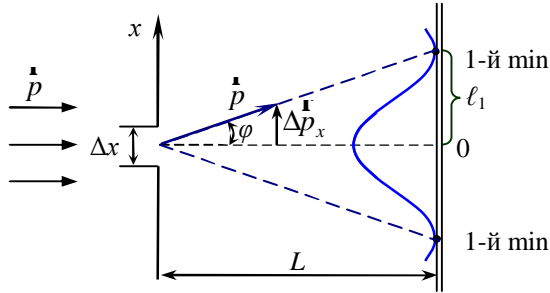


Рис.18

хвильові властивості мікрочастинки спостерігатиметься дифракційна картина (на фоточутливому екрані виникають максимуми й мінімуми інтенсивності). Це означає, що імпульс  $\vec{p}$  за щілиною не залишається строго перпендикулярним до екрану, тобто з'являється невизначеність  $\Delta p_x$ . Якщо взяти до уваги тільки центральний максимум, то найбільша невизначеність проекції імпульсу становитиме

$$\Delta p_x = p \cdot \sin j ,$$

де  $j$  - кут, що відповідає першому мінімуму при дифракції на щілині:

$$\Delta x \cdot \sin j = l .$$

Виражаючи з цього рівняння  $\sin j$ , а з формули де Бройля (2-1) імпульс  $p$ , одержимо

$$\Delta p_x = \frac{h}{l} \cdot \frac{l}{\Delta x} ,$$

звідки матимемо співвідношення  $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$ . Якщо врахувати наявність крім центрального ще дифракційні максимуми старших порядків, то  $\Delta p_x$  буде ще більше, тому для

співвідношення невизначеностей буде вигляд

$$\Delta x \cdot \Delta p_x > h,$$

що узгоджується за порядком величини з виразами (2-7), які були одержані Гейзенбергом на підставі більш строгих міркувань. З розглянутого дифракційного прикладу випливає, що коли взяти меншу за розміром  $\Delta x$  щілину (більш точно визначається координата), то збільшуватиметься кут  $j$  на перший мінімум, а отже, буде більшою невизначеність  $\Delta p_x$ . “Виною” цьому є хвильові властивості мікрочастинки.

Розглянемо ще один приклад для пояснення співвідношення (2-8). Відомо, що в атомах енергія електронів квантується, тобто електрони можуть

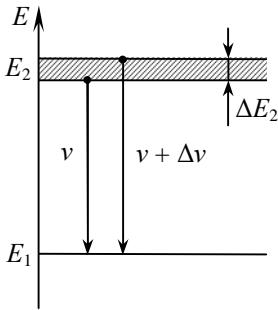


Рис.19

знаходитись тільки на певних енергетичних рівнях, наприклад,  $E_1$  та  $E_2$  (рис.19). Якщо  $E_1$  - основний рівень, то час життя на ньому  $\Delta t \rightarrow \infty$ , і значення енергії відомо точно, тобто  $\Delta E_1 = 0$ . Час життя на збуджених рівнях обмежений, як правило,  $\Delta t_{\text{жс}} \sim 10^{-8} \text{ с}$ . Це

означає, що енергія рівня  $E_2$  має невизначеність  $\Delta E_2 \sim h / \Delta t_{\text{жс}}$ . Підрахунок дає результат  $\Delta E_2 \sim 10^{-26} \text{ Дж} \sim 10^{-7} \text{ еВ}$ . Хоча це й незначне розширення рівня, проте при електронних переходах нема строгої монохроматичності випромінювання, ширина спектральної лінії становитиме  $\Delta n = \Delta E_2 / h \sim 10^8 \text{ Гц}$ , що є порівняно з оптичною частотою переходу  $n \sim 10^{15} \text{ Гц}$  надзвичайно малою величиною. На картинках спектрів такі лінії мають певну ширину.

• Не треба вважати, однак, що ні за яких умов не можна говорити про траєкторію мікрочастинки [1]. Наприклад, в

електронно-променевої трубки слід електронного пучка на екрані має радіус  $r \sim 0,1 \text{ мм}$ , а довжина самої трубки  $l \sim 10 \text{ см}$ . Тоді відношення  $\Delta p_x / p_x \sim 10^{-4}$  (рис.20). Імпульс електрона, прискореного напругою  $U$ , знайдемо за формулою (див. на

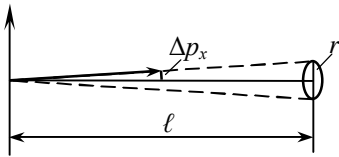


Рис.20

с. 34)  $p = \sqrt{2meU}$ . При  $U \sim 10^4 \text{ В}$  величина імпульсу  $p \approx 5 \cdot 10^{-25} \text{ кг} \cdot \text{м/с}$ . На підставі співвідношення (2-7) матимемо

$$\Delta x = \frac{\hbar/2}{\Delta p_x} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 5 \cdot 10^{-27}} \sim 10^{-8} \text{ м}.$$

Невизначеність координати  $\Delta x$  є настільки малою, що можна вести мову про цілком визначену траєкторію руху електрона.

Зовсім інший результат будемо мати для електрона в атомі, розміри якого  $\Delta x \sim 10^{-10} \text{ м}$ . Тоді невизначеність швидкості електрона на підставі (2-7) становитиме

$$\Delta V_x = \frac{\hbar/2}{m \cdot \Delta x} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} \sim 10^6 \text{ м/с}.$$

Невизначеність швидкості  $\Delta V_x$  виявилась настільки великою, що вона є співмірною з величиною самої швидкості електрона  $V$ . Ця обставина не дозволяє говорити про якісь траєкторії електронів в атомі.

• Співвідношення невизначеностей (2-7) ... (2-9) по суті є критерієм застосування класичного підходу до опису поведінки частинки [3]. Цей критерій пов'язаний з константою Планка  $\hbar$ , фізична розмірність якої (імпульс)×(довжина), (енергія)×(час) або (момент імпульсу). Величина з такою розмірністю називається дією.

Якщо в якійсь фізичній системі значення деякої характерної величини  $D$  з розмірністю  $дії$  співмірне з  $\hbar$ , то поведінка цієї системи може бути описана тільки в рамках квантової теорії. Якщо ж величина  $D$  набагато більша за  $\hbar$ , то

система з високою точністю описується законами класичної фізики. Величини макросвіту, що мають розмірність  $дії$ , значно переважають квант дії  $h$ , тому до макросистем достатньо застосовувати закони класичної фізики.

Співвідношення невизначеностей показують, яким чином слід користуватись поняттями класичної механіки (імпульсом, енергією, координатами, моментом імпульсу) при переході в область мікросвіту. Ці поняття мають певний зміст, проте з обмеженнями, які накладаються формулами (2-7)...(2-9). Разом з тим ці формули не тільки зводяться до обмеження застосування понять класичної фізики в мікросвіті, але також є робочим інструментом квантової фізики для одержання простим шляхом важливих оцінок поведінки мікросистем.

## Задачі

**2.1. Формула де Бройля.** Знайти дебройлівську довжину хвилі електрона, який прискорений напругою  $U=15000 \text{ В}$ . Розв'язання. Згідно з формулою де Бройля (2-1)

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

де  $p$  – імпульс електрона. Якщо електрон прискорюється напругою  $U$ , то його імпульс  $p = \sqrt{2meU}$ . Отже, довжину хвилі знайдемо за формулою

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}}.$$

Виконаємо обчислення:

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 1,5 \cdot 10^4}} = 10^{-11} \text{ м}.$$

**2.2. Дифракція електронів.** Пучок електронів з швидкістю  $V = 10^6 \text{ м/с}$  падає нормально на екран з вузькою щіли-



линою завширшки  $\Delta x = 1 \text{ мкм}$ . Знайти ширину центрального дифракційного максимуму на екрані, який розміщений на відстані  $L = 50 \text{ см}$  від щілини.

**Р о з в' я з а н н я.** Картина дифракції електронів на щілині показана на рис. 18. Ширина центрального максимуму  $b = 2l_1$ , де  $l_1$  - відстань від центра до першого дифракційного мінімуму. З геометрії рисунка  $l_1 = L \cdot \operatorname{tg} j$ , де  $j$  - кут на перший дифракційний мінімум. Його можна знайти з умови для мінімуму при дифракції на щілині

$$\Delta x \cdot \sin j = n \cdot \lambda.$$

Оскільки кут  $j$  малий, то  $\operatorname{tg} j \approx \sin j$ , і для  $n = 1$  маємо  $\operatorname{tg} j = \lambda / \Delta x$ . Довжину хвилі електрона знайдемо за формулою де Бройля  $\lambda = h / mV$ . Тоді остаточно ширина максимуму

$$b = 2L \frac{h}{\Delta x \cdot mV}.$$

Виконаємо обчислення:

$$b = \frac{2 \cdot 0,5 \cdot 6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-6} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^6} = 0,73 \cdot 10^{-3} \text{ м} = 0,73 \text{ мм}.$$

**2.3. Співвідношення невизначеностей.** Оцінити найнижчий енергетичний стан електрона в атомі водню. Вважати, що лінійні розміри атома  $l \sim 1 \text{ А}$ .

**Р о з в' я з а н н я.** Співвідношення невизначеностей (2-7) для оцінки стану електрона представимо як  $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h$ .

Електрон буде перебувати поблизу ядра в області з лінійними розмірами  $r = \Delta x \sim l/2$ . Найнижчий енергетичний стан характерний тим, що найменший імпульс електрона дорівнює величині невизначеності імпульсу, тобто  $\Delta p_x \sim p_{\min}$ . Підставляючи невизначеності координат й імпульсу в співвідношення, матимемо  $p_{\min} \cdot l/2 \sim h$ , звідки оцінка імпульсу електрона в найнижчому енергетичному стані буде такою:

$$p_{\min} \sim \frac{2h}{l}.$$

Кінетична енергія зв'язана з імпульсом виразом  $T = p^2 / 2m$ , то для найнижчого енергетичного стану

$$T_{\min} = \frac{p_{\min}^2}{2m} \sim \frac{2h^2}{m \cdot l^2}.$$

Потенціальна енергія кулонівської взаємодії електрона з ядром на відстані  $r$  виражається як  $\Pi = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 r$ . Таким чином, повна мінімальна енергія електрона в атомі водню

$$E_{\min} = T_{\min} + \Pi \sim \frac{2h^2}{m \cdot l^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}.$$

Виконаємо обчислення:

$$\begin{aligned} E_{\min} &\sim \frac{2 \cdot 1,05^2 \cdot 10^{-68}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-20}} - 9 \cdot 10^9 \cdot \frac{2 \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}}{10^{-10}} = \\ &= -21,9 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = -13,6 \text{ eB}. \end{aligned}$$

Цей результат майже точно збігається з величиною енергії основного стану електрона в атомі водню, що свідчить на користь проведеної оцінки.

### Стислі висновки

1. Згідно з гіпотезою Луї де Бройля всі без виключення частинки матерії виявляють хвильові властивості. Довжина хвилі, зв'язана з частинкою, що рухається, визначається за універсальною формулою

$$l = \frac{h}{mV}.$$

Найбільш помітно хвильові властивості мають виявляти частинки з дуже малою масою (мікрооб'єкти).

2. Ціла низка дослідів з розсіяння на кристалічних структу-

рах електронів, нейтронів, атомних та молекулярних пучків переконливо узгоджується з уявленням про дифракцію хвиль, довжина яких визначається формулою де Бройля.

3. Суттєвим є те, що хвильові властивості притаманні не пучку мікрочастинок, а *кожній* мікрочастинці окремо. Це призводить до поняття *корпускулярно-хвильової* природи мікрооб'єктів.
4. Особлива двоїста природа мікрочастинок не дозволяє використовувати звичайний апарат класичної фізики для опису їх поведінки. Класичні уявлення про траєкторію руху мікрочастинок виявляються непридатними. Співвідношення невизначеностей  $\Delta x \cdot \Delta p_x > \hbar/2$ ,  $\Delta E \cdot \Delta t > \hbar/2$  показують ступінь придатності понять класичної фізики в області мікросвіту.

### Питання для самоконтролю

1. Як експериментально можна спостерігати хвильову природу мікрооб'єктів?
2. В чому полягає корпускулярно-хвильовий дуалізм мікрочастинок?
3. Записати формулу Луї де Бройля і на її підставі проаналізувати, наскільки помітні хвильові властивості мікро- та макрооб'єктів.
4. У чому полягає фізичний зміст співвідношень невизначеностей Гейзенберга?
5. В яких випадках можна говорити про траєкторію мікрочастинок в класичному розумінні?

## Глава 3. Елементи квантової механіки

### § 3.1. Поняття хвильової функції

В 20-х роках XX ст. була створена нова механіка – квантова (або хвильова) механіка, яка змогла дати правильний і повний опис поведінки частинок, що мають хвильові властивості. Розглянемо вихідні принципи квантової механіки.

• Для з'ясування методу опису поведінки мікрооб'єктів скористаємось порівнянням корпускулярного й хвильового підходу при розгляді природи світла [1]. Згідно з формулою (1-36) ймовірність знаходження фотона в якійсь області простору визначається квадратом амплітуди електричної складової світлової хвилі. Одразу ж відмітимо, що такий опис не дає точних відомостей про поведінку конкретного фотона, проте за наявності великої статистики буде точно виконуватись.

У дослідах, пов'язаних з дифракцією електронів (див. рис.17,б), величина, аналогічна інтенсивності, вимірюється почорнінням фотопластинки, тобто кількістю електронів, які попали на одиницю площі за одиницю часу. Щоб описати дифракцію електронів, треба прийняти, що з їх рухом зіставлена деяка хвильова функція  $\psi(x,y,z,t)$ , яка залежить від координат і часу. Такий *математичний формалізм* дозволяє, з одного боку, повністю описати хвильові властивості мікрооб'єктів, і з другого боку, зняти питання про природу або якусь інтерпретацію хвиль де Бройля.

У 1926 р. М. Борн дав ймовірнісну інтерпретацію псі-функції. По аналогії з дифракцією світла було запропоновано ввести  $\psi$ -функцію таким чином, щоб з її допомогою визначати ймовірність знаходження електрона в якійсь області простору. Оскільки  $\psi$ -функція в загальному випадку є комплексною, вона недоступна для спостереження. Ймовір-

ність знаходження частинки є величиною дійсною і експериментально спостережуваною. Тому ймовірність знаходження частинки  $dP$  в об'ємі  $dV$  має характеризуватися *квадратом модуля* псі-функції, тобто

$$dP = |y|^2 \cdot dV = y \cdot y^* \cdot dV, \quad (3-1)$$

де  $y^*$  - комплексно спряжена функція.

Отже, фізичний смисл має не сама хвильова функція  $y$ , а квадрат її модуля

$$|y|^2 = \frac{dP}{dV}. \quad (3-2)$$

Ця величина визначає *густину ймовірності* знаходження частинки в одиниці об'єму.

•Ймовірнісний характер опису поведінки мікрооб'єктів за допомогою псі-функції накладає на неї певні обмеження, пов'язані з фізичним змістом. Функція  $y = y(x, y, z, t)$  має задовольняти такі три умови:

- 1) функція  $y$  повинна бути *скінченою, неперервною й однозначною*;
- 2) похідні  $\frac{\partial y}{\partial x}, \frac{\partial y}{\partial y}, \frac{\partial y}{\partial z}, \frac{\partial y}{\partial t}$  повинні бути неперервними;
- 3) функція  $|y|^2$  повинна задовольняти умову *нормування*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |y|^2 dx \cdot dy \cdot dz = 1. \quad (3-3)$$

Умова (3-3) означає, що перебування частинки десь в усьому просторі, де  $y \neq 0$ , є подією вірогідною, тобто ймовірність знайти частинку в якійсь точці нескінченного простору дорівнює одиниці.

Загальний запис хвильової функції  $y$  для вільної частинки, що рухається в довільному напрямку, на підставі (2-4) має такий вигляд:

$$y(\mathbf{r}, t) = A e^{i \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - Et}{\hbar}}, \quad (3-4)$$

де  $\vec{p}$  - імпульс частинки,  $E$  - її повна енергія,  $\vec{r}$  - радіус-вектор точки простору,  $t$  - час,  $A$  - амплітуда хвильової функції.

### § 3.2. Рівняння Шредінгера

•В 1926р. австрійський фізик-теоретик Е.Шредінгер знайшов рівняння, з якого можна було одержати хвильову функцію частинки, що рухається в потенціальному полі сил. Це є **основне рівняння нерелятивістської квантової механіки**. Рівняння Шредінгера треба сприймати як новий фундаментальний закон, який не може бути виведений з попередніх уявлень або теорій. Його треба розглядати як певне головне вихідне твердження, що лежить в основі квантової механіки, де воно відіграє таку саму роль, як закони Ньютона в класичній механіці. Справедливість рівняння Шредінгера підтверджується тим, що всі висновки квантової механіки, одержані за допомогою цього рівняння, прекрасно узгоджуються з експериментальними результатами.

Рівняння Шредінгера має такий вигляд:

$$j\hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \Psi + P(x, y, z, t) \cdot \Psi, \quad (3-5)$$

де  $\hbar$  - стала Планка,  $j = \sqrt{-1}$  - уявна одиниця,  $m$  - маса частинки,  $P(x, y, z, t)$  - потенціальна енергія частинки в силовому полі, де вона рухається,  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  - оператор Лапласа.

Вигляд хвильової функції  $\Psi(x, y, z, t)$ , як впливає з (3-5), визначається виглядом потенціальної енергії  $P(x, y, z, t)$ , тобто характером тих сил, що діють на частинку. Необхідно також зазначити, що розв'язок рівняння Шредінгера, тобто знайдена  $\Psi$ -функція, має задовольняти три умови, що були розглянуті в попередньому параграфі. Оскільки в (3-5) фігурує залежність від часу  $t$ , то воно називається *часовим*

або загальним рівнянням Шредінгера. З погляду математики рівняння Шредінгера являє собою лінійне диференціальне рівняння з частинними похідними.

•Особливе місце в квантовій теорії займають стаціонарні стани, в яких спостережувані фізичні величини не міняються з часом. Наприклад, в атомі електрони рухаються в стаціонарному полі сил, тобто потенціальна енергія електрона не залежить явно від часу. В цьому випадку розв'язок рівняння Шредінгера розпадається на два множники, один з яких залежить тільки від координат (амплітудна частина хвильової функції), другий – тільки від часу [1]:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-j(E/\hbar)t}, \quad (3-6)$$

де  $E$  – повна енергія частинки.

Після підстановки виразу (3-6) в рівняння (3-5) множник, що містить часову залежність, скорочується, і буде одержане диференціальне рівняння відносно функції  $\psi$ :

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x, y, z)] \cdot \psi = 0. \quad (3-7)$$

Це рівняння називається *рівнянням Шредінгера для стаціонарних станів*. Розв'язок цього рівняння  $\psi(x, y, z)$  не залежить від часу і також має задовольняти умови, що накладаються на хвильову функцію.

Функції  $\psi$ , які є розв'язком рівняння Шредінгера (3-7), називаються **власними функціями**, а значення повної енергії  $E$ , при яких можливі ці розв'язки, називаються **власними значеннями**.

Рівняння Шредінгера має досить складний вигляд. В літературі, наприклад [1, 2], наводяться різні міркування, на підставі яких можна “вгадати” його вигляд. Однак ці шляхи все одно не можна вважати виводом рівняння Шредінгера.

Застосування основного закону квантової механіки – рівняння Шредінгера - для мікросистем природним шляхом призводить до понять квантування фізичних величин та

ймовірнісного опису поведінки мікрооб'єктів. Хоча в реальних задачах розв'язання рівняння Шредінгера є дуже складною процедурою, часом неможливою в аналітичному вигляді, в деяких простіших випадках, однак, вона є досить почвальною.

### § 3.3. Частинка в одновимірній потенціальній ямі

Розглянемо приклад застосування основного рівняння квантової механіки до частинки, яка знаходиться в нескінченно глибокій одновимірній прямокутній потенціальній ямі (рис. 21). Припустимо, що частинка може рухатись тільки

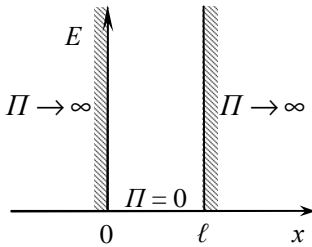


Рис.21

вздовж осі  $x$ , причому її потенціальна енергія  $P = 0$  в межах ями  $0 < x < l$ . В точках  $x < 0$  та  $x > l$  величина  $P \rightarrow \infty$ , тобто за межі ями частинка вийти не може. Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера (3-7), враховуючи, що  $P=0$ , і що в операторі Лапласа буде присутня

тільки похідна від однієї координати  $x$ :

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot y = 0. \quad (3-8)$$

Ввівши позначення

$$w^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad (3-9)$$

матимемо рівняння (3-8) в такому вигляді:

$$y'' + w^2 \cdot y = 0. \quad (3-10)$$

Останнє рівняння є рівнянням гармонічного осцилятора, його розв'язок має такий вигляд:

$$y(x) = A \sin(wx + a). \quad (3-11)$$

Щоб визначити псі-функцію, треба встановити значення ве-



личин  $A$ ,  $w$  та  $a$ . Для цього скористаємось граничними умовами для функції  $y$ . Оскільки ймовірність знайти частинку за межами ями дорівнює нулю, то з умови неперервності псі-функції випливає, що на границях ями вона теж повинна дорівнювати нулю, тобто

$$y(0) = y(l) = 0. \quad (3-12)$$

В точці  $x = 0$  для функції (3-11) матимемо  $y(0) = A \sin a = 0$ , звідки одержуємо, що  $a = 0$ . В точці  $x = l$  псі-функція теж дорівнює нулю, тобто

$$y(l) = A \sin wl = 0.$$

Це рівняння виконується, коли

$$wl = \pm n \cdot \pi, \quad (3-13)$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$  - ціле число. Випадок  $n = 0$  відпадає, оскільки тоді  $y(x) \equiv 0$ , тобто частинка просто відсутня. Підставляючи  $w$  з (3-13) в формулу (3-9), знайдемо *власні значення енергії* частинки

$$E_n = n^2 \cdot \frac{p^2 \hbar^2}{2ml^2}, \quad (3-14)$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$  - ціле число, яке називають **квантовим числом**.

Отже, розв'язок рівняння Шредінгера має фізичний зміст тільки для дискретних значень повної енергії частинки (3-14).

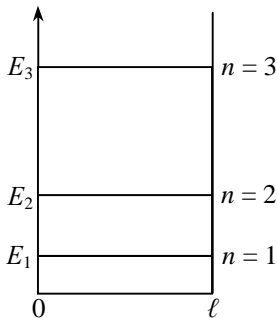


Рис.22

На рис.22 показана схема дозволених енергетичних рівнів, які визначаються цілими числами  $n$ . Найнижчий енергетичний рівень ( $n = 1$ ) називається *основним станом*. Йому відповідає енергія

$$E_1 = \frac{p^2 \hbar^2}{2ml^2} > 0.$$

Це означає, що для мікрочастинки

тинок ні за яких умов не припиняється рух, навіть при абсолютній температурі  $T = 0$ . Ця обставина являє собою загальний результат квантової механіки, який абсолютно неприйнятний для класичної фізики.

Власні функції знайдемо, підставляючи в (3-11)  $a = 0$  та  $w$  з умови (3-13):

$$y_n(x) = A \sin\left(n \frac{p}{l} x\right). \quad (3-15)$$

Для знаходження коефіцієнта  $A$  скористаємось умовою нормування (3-3), яка для цієї задачі має такий вигляд:

$$A^2 \int_0^l \sin^2\left(n \frac{p}{l} x\right) dx = 1. \quad (3-16)$$

Згідно з теоремою про середнє інтеграл у (3-16) можна представити як добуток інтервалу  $l$  на середнє значення квадрата синуса, яке дорівнює  $1/2$ . Тоді матимемо:  $A^2(1/2) \cdot l = 1$ , звідки  $A = \sqrt{2/l}$ . Таким чином, *власні функції* запишуться так:

$$y_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cdot \sin\left(n \frac{p}{l} x\right). \quad (3-17)$$

На рис. 23 наведені графіки псі-функції  $y_n(x)$  та розподіли густини ймовірності  $|y_n(x)|^2$  для різних енергетичних

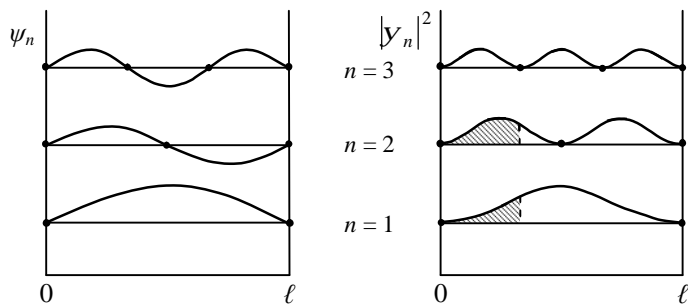


Рис.23

станів частинки в потенціальній ямі. З графіків видно, що хвильові функції утворюють картину, подібну до стоячих хвиль, причому на границях ями будуть вузли відповідно до граничних умов (3-12). Поведінка  $|y_n(x)|^2$  дає уявлення про ймовірність знаходження частинки в різних точках ями. Наприклад, у стані з  $n = 1$  найбільша ймовірність перебування частинки буде в центрі ями, тоді як у стані з  $n = 2$  в центрі частинка не буває зовсім, але з найбільшою ймовірністю її можна знайти посередині першої та другої половинок ями.

Таке уявлення абсолютно відрізняється від класичного опису руху частинки. Згідно з класичною фізикою частинка в потенціальній ямі могла б мати будь-яке значення повної енергії  $E$ , в тому числі й  $E = 0$ , причому всі положення частинки були б рівноймовірними.

Слід відзначити, що при  $n \rightarrow \infty$  число максимумів і мінімумів густини ймовірності  $|y_n(x)|^2$  сильно зростає. Це дозволяє говорити про практично рівну ймовірність знаходження частинки в кожній точці ями. У цьому полягає так званий *принцип відповідності*, в якому розглядаються умови переходу від квантової механіки до класичної.

### § 3.4. Тунельний ефект

Будь-яка взаємодія в природі характеризується величиною потенціальної енергії. У зв'язку з цим дуже цікавою й незвичною виявляється поведінка мікрочастинки в області *потенціального бар'єра* (рис.24). Під потенціальним бар'єром розуміють область простору, в якій потенціальна енергія  $\Pi_0$  частинки більше її повної енергії  $E$ .

В області потенціального бар'єра кінетична енергія частинки  $T = E - \Pi_0 < 0$ , а це означає, що її швидкість  $V$  – уявна величина, тобто з погляду класичної фізики вона не може

проходити в область бар'єра або за бар'єр. Для мікрооб'єктів, однак, спостерігається проникнення їх крізь бар'єр без зміни повної енергії  $E$ . Це явище одержало назву **тунельного ефекту**, оскільки частинка не піднімається на вершину бар'єра, а долає його ніби через тунель.

Пояснення [7] тунельного ефекту для мікрочастинки можна зрозуміти на підставі співвідношень невизначеностей (2-7) та (2-8). Оскільки мікрочастинка не може мати одночасно точні значення імпульсу і координати, а отже, кінетичної та потенціальної енергії, то вона може пройти

крізь бар'єр, маючи невизначеність повної енергії  $\Delta E = \Pi_0 - E$  (див. задачу 3.3).

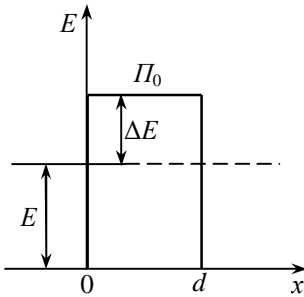


Рис.24

ного бар'єра у випадку одновимірної задачі:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - \Pi_0) \cdot y = 0. \quad (3-18)$$

Оскільки  $E - \Pi_0 < 0$ , то введемо позначення

$$b^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\Pi_0 - E). \quad (3-19)$$

Тоді рівняння (3-18) буде мати такий вигляд:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - b^2 y = 0. \quad (3-20)$$

Розв'язком такого диференціального рівняння буде функція

$$y(x) = A_1 e^{-bx} + A_2 e^{bx}, \quad (3-21)$$

де  $A_1$  та  $A_2$  - константи, які визначаються умовами задачі. З фізичних міркувань випливає, що ймовірність знаходження частинки в бар'єрі повинна зменшуватись при збільшенні відстані  $x$ , тому треба взяти  $A_2=0$ , і в (3-21) залишиться експонента, що зменшується. Таким чином, в області бар'єра частинка описується хвильовою функцією

$$y(x) = A_1 e^{-bx} = A_1 e^{-(1/\hbar)\sqrt{2m(\Pi_0-E)}x}. \quad (3-22)$$

Оцінимо ймовірність проходження частинки крізь потенціальний бар'єр, тобто **коефіцієнт прозорості бар'єра**. Ця величина дорівнює відношенню густини ймовірності знаходження частинки за бар'єром ( $x=d$ ) і перед бар'єром ( $x=0$ ):

$$D = \frac{|y(d)|^2}{|y(0)|^2} \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(\Pi_0-E)}d}. \quad (3-23)$$

Як видно з (3-23), прозорість бар'єра  $D$  сильно залежить від його товщини  $d$ , “перевищення” повної енергії частинки ( $\Pi_0 - E$ ), а також маси частинки  $m$ . Приблизно можна вважати, що тунельний ефект досить помітний за умови

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(\Pi_0-E)} \cdot d < 1. \quad (3-24)$$

В реальних задачах потенціальний бар'єр може бути не прямокутним (рис.25), тобто має місце залежність  $\Pi = \Pi(x)$ . Тоді формулу (3-23) треба замінити на більш загальний вираз:

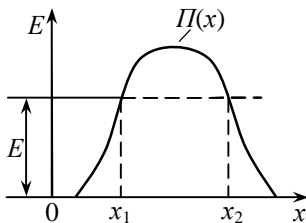


Рис.25

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[\Pi(x) - E]} \cdot dx \right\}$$

Тунельний ефект лежить в основі низки фізичних явищ, які не мають пояснень в межах класичної фізики. Завдяки цьому ефекту пояснюються закономірності  $\alpha$ -розпаду ядер,

процес термоядерного синтезу, холодна емісія електронів з металу, обмін валентними електронами між атомами, стаціонарний ефект Джозефсона та інші явища, на його основі ґрунтується, зокрема, робота тунельних діодів.

### § 3.5. Квантовий гармонічний осцилятор

Застосуємо стаціонарне рівняння Шредінгера до одновимірного *гармонічного осцилятора*, щоб з'ясувати питання про дозволені енергетичні стани такої системи в квантовій механіці.

Нехай мікрочастинка здійснює коливання вздовж осі  $x$  так, що її потенціальна енергія залежить від  $x$  як у класичного осцилятора, а саме

$$П(x) = \frac{k \cdot x^2}{2}, \quad (3-25)$$

де  $k$  - коефіцієнт пропорційності, подібний до жорсткості пружини класичного осцилятора. Графік цієї функції зображений на рис. 26 пунктирною лінією. Як відомо з класичної теорії, гармонічні коливання відбуваються з циклічною частотою  $\omega = \sqrt{k/m}$ . Виражаючи  $k$  через  $\omega$  і масу частинки  $m$ , формулу (3-25) запишемо так:

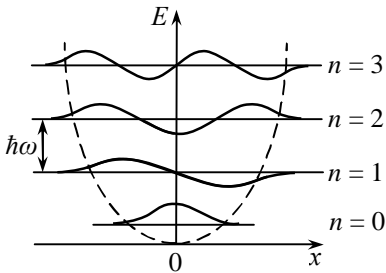


Рис.26

$$П(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (3-26)$$

Запишемо рівняння Шредінгера (3-7) для *одновимірного квантового осцилятора*:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar} \left( E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) y = 0. \quad (3-27)$$

Розв'язання цього рівняння є досить складною математичною

задачею [2, 3]. Виявляється, що власні  $y$ -функції цього рівняння мають місце при певних власних значеннях енергії  $E$ , а саме

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (3-28)$$

де  $n = 0, 1, 2, \dots$  - ціле число.

Дискретні енергетичні рівні та відповідні до цих станів  $y$ -функції зображені на рис.26. Картина дещо нагадує поведінку частинки в прямокутній ямі (див. рис.22, 23). Відмінність полягає в тому, що в цій задачі енергетичні рівні *еквідистантні* (між ними відстань  $\Delta E = \hbar \omega$ ), найнижчий так званий *нульовий рівень* теж не дорівнює нулю ( $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ ), а  $y$ -функції трохи виходять за межі параболи (прямокутна яма мала нескінченно високі стінки, тому на границях ями  $y$ -функції мали дорівнювати нулю).

Наявність нульової енергії підтверджуються експериментально при розсіянні світла кристалами, коли температура  $T \rightarrow 0$ . При таких температурах всі речовини знаходяться в кристалічному стані, а частинки (атоми, молекули, іони), що знаходяться у вузлах кристалічної решітки, поведуть себе як осцилятори з мінімальною енергією. На цих нульових коливаннях і відбувається розсіяння квантів світла.

Цікаво, що тільки така речовина, як гелій, при  $T \rightarrow 0$  залишається рідиною, якщо тиск не перевищує 2,53 МПа [8]. Це пояснюється тим, що у гелію частота коливань атомів достатньо велика ( $\omega = \sqrt{k/m}$ ), оскільки мала маса  $m$ , а значить, буде порівняно велика нульова енергія. Гелій є інертним газом, між атомами сили взаємодії досить малі. Такі обставини призводять до того, що гелій залишається в рідкому стані. Через те, що причиною цього є квантовий ефект, його називають *квантовою рідиною*.

Детальний квантовомеханічний аналіз для квантового осцилятора призводить до так званого *правила добору*, згідно з яким

$$\Delta n = \pm 1. \quad (3-29)$$

Це означає, що для квантового осцилятора можливі переходи лише між *сусідніми* енергетичними рівнями. При кожному з таких переходів випускається або поглинається квант енергії (фотон) з енергією  $h\nu$ . Це повністю узгоджується з гіпотезою Планка, висунутою для пояснення спектра випромінювання абсолютно чорного тіла (див. § 1.4).

Теорія квантового осцилятора використовується в теорії Дебая для теплоємності твердих тіл, при формуванні поняття теплових коливань у кристалах і представленні їх як газу фононів, а також у ряді інших задач.

### Задачі

#### 3.1. Ймовірність місцезнаходження мікрочастинки.

Частинка знаходиться в прямокутній одновимірній нескінченно глибокій ямі шириною  $l$ . Знайти ймовірність перебування частинки в інтервалі  $0 < x < (l/3)$  для енергетичних станів з  $n = 1$  та  $n = 2$ .

Розв'язання. Інтегрування (3-1) для одновимірної задачі з урахуванням вигляду власних псі-функцій (3-17) дає такий вираз:

$$\begin{aligned} P &= \int_0^{l/3} |Y_n(x)|^2 \cdot dx = \frac{2}{l} \int_0^{l/3} \sin^2(n\pi x/l) dx = \\ &= \frac{2}{l} \cdot \frac{1}{2} \int_0^{l/3} [1 - \cos(2n\pi x/l)] dx = \\ &= \frac{1}{l} \left[ x - \frac{l}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{l} x\right) \right]_0^{l/3} = \frac{1}{3} - \frac{1}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{3}\right). \end{aligned}$$

Обчислення для  $n = 1$  та  $n = 2$ . дає такі результати:



$P_1 = 0,195$  і  $P_2 = 0,402$ . Ці ймовірності відповідають заштрихованим площам на рис.23.

**3.2. Нульовий енергетичний рівень.** Оцінити енергію найнижчого рівня для молекули газу з  $m \sim 10^{-26}$  кг у посудині розміром  $l \sim 0,1$  м та електрона в ямі, що відповідає розмірам атома ( $l \sim 10^{-10}$  м).

Розв'язання. Власні значення енергії для частинки в одновимірній нескінченній прямокутній ямі визначаються за формулою (3-14). Для найнижчого рівня  $n = 1$ , тоді маємо

$$E_1 = \frac{p^2 \hbar^2}{2ml^2}.$$

Обчислюємо для молекули:

$$E_1 \sim \frac{3,14^2 \cdot 1,05^2 \cdot 10^{-68}}{2 \cdot 10^{-26} \cdot 0,1^2} \approx 5 \cdot 10^{-40} \text{ Дж} \approx 3 \cdot 10^{-21} \text{ eV},$$

що є дуже малою величиною, тобто практично  $E_1 = 0$ .

Зробимо обчислення для електрона:

$$E_1 \sim \frac{3,14^2 \cdot 1,05^2 \cdot 10^{-68}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-20}} \approx 5 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} \approx 30 \text{ eV},$$

що є досить значною величиною.

**3.3. Тунельний ефект.** Електрон рухається в області прямокутного потенціального бар'єра товщиною  $d$ , висота потенціального бар'єра  $P_0 = 10 \text{ eV}$ , а повна енергія електрона  $E = 8 \text{ eV}$ . Оцінити товщину бар'єра, при якій тунельний ефект буде досить помітним.

Розв'язання. Прозорість бар'єра (рис. 24) визначається формулою (3-23). Досить помітним тунельний ефект буде тоді, коли показник степеня в (3-23) близький до 1. Тому вираз, за яким можна проводити оцінку товщини бар'єра, має вигляд (3-24), тобто

$$\frac{2}{h} \sqrt{2m(\Pi_0 - E)} \cdot d < 1.$$

З цієї формули для товщини бар'єра одержимо

$$d < \frac{h}{2\sqrt{2m(\Pi_0 - E)}}. \quad (1)$$

Виконаємо обчислення:

$$d < \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} (10 - 8) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \sim 0,6 \cdot 10^{-10} \text{ м} \approx 0,6 \text{ \AA}.$$

Отже, оцінка товщини бар'єра – менше одного ангстрема.

Інший підхід до розв'язання цієї задачі ґрунтується на співвідношенні невизначеностей (2-7). Якщо прийняти, що невизначеність координати  $\Delta x \equiv d$ , а невизначеність імпульсу пов'язати з невизначеністю енергії частинки  $\Delta p_x = \sqrt{2m \cdot \Delta E}$ , де  $\Delta E = \Pi_0 - E$  - брак енергії для подолання потенціального бар'єра, співвідношення (2-7) набуває вигляду

$$d \sqrt{2m(\Pi_0 - E)} > h/2. \quad (2)$$

Виражаючи невизначеність координати з (2) як

$$d \sim \frac{h}{2\sqrt{2m(\Pi_0 - E)}},$$

знову маємо оціночний результат, що збігається з (1).

### Стислі висновки

1. Квантова механіка застосовує статистичний (або ймовірнісний) підхід для опису поведінки мікрооб'єктів. Стан мікрочастинки описується за допомогою хвильової функції  $\psi(x, y, z, t)$ . Фізичний зміст має не сама  $\psi$ -функція, а  $|\psi|^2$ , який визначає густину ймовірності знаходження частинки в кожній точці простору.

2. Псі-функція може бути знайдена при розв'язанні рівняння Шредінгера, записаного з урахуванням умови конкретної задачі (характер взаємодії визначається виглядом потенціальної енергії  $P(x, y, z, t)$ ). Рівняння Шредінгера є диференціальним рівнянням відносно функції  $\psi$  і представляє собою по суті *новий фізичний закон*, що діє в мікросвіті.
3. Розв'язання рівняння Шредінгера для мікрочастинки в прямокутній потенціальній ямі призводить до поняття дискретності енергетичних станів і неоднакової ймовірності її перебування в різних частинах ями.
4. Застосування рівняння Шредінгера до квантового осцилятора призводить до поняття *еквідистантних* енергетичних рівнів, а також *нульової енергії* осцилятора. Згідно з правилом добору можливі переходи тільки між сусідніми рівнями, при цьому поглинається або випромінюється квант енергії  $h\nu$ .
5. Для мікрооб'єктів є характерним специфічне явище – *тунельний ефект*, який полягає в проходженні частинок крізь потенціальний бар'єр. Прозорість бар'єра стає досить помітною при малих значеннях різниці енергій  $P_0 - E$  та малих товщинах  $d$  бар'єра, що має місце в квантових системах. Для класичної механіки таке явище є зовсім чужим.
6. Імовірнісний характер опису поведінки мікрочастинки, неможливість *точного передбачення* її поведінки в кожному акті взаємодії привело ряд вчених, зокрема А.Ейнштейна, до висновків про “неповноту квантової механіки” [9]. Ця проблема має право на існування, тому не треба вважати, що квантова механіка є остаточно завершеною дисципліною.

*Питання для самоконтролю*

- 1. Який фізичний зміст має псі-функція? Які умови вона має задовольняти?*
- 2. Дайте характеристику загального і стаціонарного рівнянь Шредінгера.*
- 3. Якими є особливості поведінки мікрочастинки в нескінченно глибокій прямокутній потенціальній ямі?*
- 4. У чому полягає тунельний ефект? Яке його пояснення?*
- 5. Якими є особливості поведінки квантового осцилятора?*

## Глава 4. Фізика атомів і молекул

### § 4.1. Будова атомів. Формула Бальмера

• На початку XX ст. у фізиці остаточно склалось уявлення, що атоми є складними системами, до складу яких входять електрони. На підставі кінетичної теорії газів оцінка розмірів атомів (молекул) показувала, що їх діаметр  $d \sim 10^{-10} \text{ м}$ .

Питання про розподіл електричних зарядів і мас всередині атома були з'ясовані завдяки відомому досліді Е. Резерфорда в 1911 р. Дослід полягав у розсіянні  $\alpha$ -частинок на атомах тонкої металевої фольги [1, 2, 4, 8]. При проходженні крізь фольгу завдяки кулонівській взаємодії  $\alpha$ -частинки відхилялись від початкового напрямку руху на різні кути  $\theta$  залежно від *прицільного параметра*  $p_0$  (рис.27). Виявилось, що переважна більшість  $\alpha$ -частинок відхиляється на невеликі кути  $\theta \sim 1^\circ$ , однак є окремі  $\alpha$ -частинки, що відхиляються майже на  $180^\circ$ . Оскільки маса  $\alpha$ -частинок в 7300 разів більша за масу електрона, то розсіяння  $\alpha$ -частинок можливе тільки в тому випадку, якщо в центрі атома знаходиться досить мале за розмірами позитивно заряджене ядро, в якому зосереджена практично вся маса атома. На основі експериментальних даних було встановлено, що позитивний заряд ядра дорівнює добутку порядкового номера елемента  $Z$  в

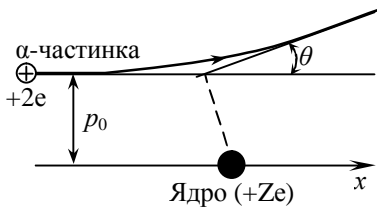


Рис.27

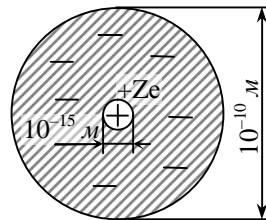


Рис.28

таблиці Менделєєва на елементарний заряд  $e$ , тобто  $Ze$ , а розміри ядра не перевищують  $10^{-14} \dots 10^{-15} \text{ м}$ . Навколо ядра обертаються  $Z$  електронів, які утримуються в атомі кулонівськими силами. Таку атомну модель Резерфорда (рис.28) називають *ядерною* або *планетарною* через її подібність до будови Сонячної системи.

Однак така модель атома є зовсім незадовільною з огляду на закони класичної електродинаміки. Дійсно, якщо електрон рухається по криволінійних траєкторіях, то це рух з доцентровим прискоренням, значить, він повинен *безперервно* випромінювати електромагнітні хвилі, причому спектр має бути *суцільний*. Випромінюючи, електрон втрачає енергію і за час  $\sim 10^{-11} \text{ с}$  мав би впасти на ядро. Насправді ж атом є стійкою системою.

• Дослідження спектрів випромінювання і поглинання атомів показало, що вони складаються з ліній окремих частот, тобто спектри є **лінійчастими**. Лінії в спектрах атомів розташовані в такій закономірності, що їх можна об'єднати в групи або *серії ліній*. Лінійчасті спектри різних хімічних елементів відрізняються між собою, до того ж кожна з ліній має свою інтенсивність.

На рис.29 представлений спектр найпростішого атома – водню (гідрогену). Символами  $H_a$ ,  $H_b$ ,  $H_g$  та  $H_d$  позначені

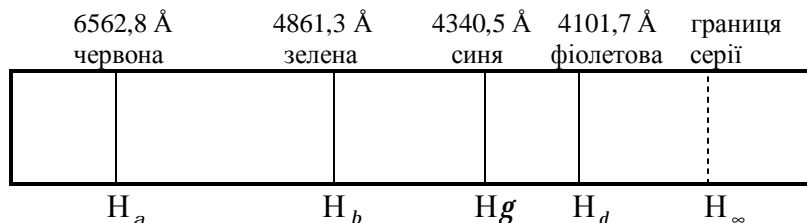


Рис.29

*лінії видимої частини спектра,  $H_\infty$  - границя серії, що містить видиму й близьку ультрафіолетову область.*

У 1885 р. швейцарський фізик Й. Бальмер установив, що довжини хвиль цієї серії ліній атомарного водню мають певну закономірність і можуть бути виражені за допомогою цілих чисел. Формула Бальмера має такий вигляд:

$$n^* = \frac{1}{l} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4-1)$$

де  $n = 3, 4, 5, \dots$  - цілі числа,  $R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  - стала Рідберга,  $n^* = 1/l$  - **хвильове спектроскопічне число**, яке показує, скільки довжин хвиль уміщується на довжині 1м. Серія ліній атомарного водню, яка описується цією формулою, називається *серією Бальмера*.

Згодом були відкриті ще кілька серій. В ультрафіолетовій області існує серія Лаймана, решта серій – в інфрачервоній. Лінії цих серій описуються такими формулами:

$$\text{серія Лаймана} \quad n^* = \frac{1}{l} = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, 4, \dots),$$

$$\text{серія Пашена} \quad n^* = \frac{1}{l} = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, 6, \dots),$$

$$\text{серія Бреккета} \quad n^* = \frac{1}{l} = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, 7, \dots),$$

$$\text{серія Пфунда} \quad n^* = \frac{1}{l} = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 6, 7, 8, \dots),$$

$$\text{серія Хемфрі} \quad n^* = \frac{1}{l} = R \left( \frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 7, 8, 9, \dots).$$

Лінії всіх серій можна записати у вигляді **узагальненої формули Бальмера**, а саме

$$n^* = \frac{1}{l} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4-2)$$

де  $m$  і  $n$  – цілі числа, причому  $m = 1$  для серії Лаймана,  $m = 2$  для серії Бальмера,  $m = 3$  для серії Пашена і т. д., а  $n = m+1, m+2, m+3, \dots$  в межах кожної серії.

При зростанні числа  $n$  довжина хвилі в кожній серії згідно з (4-2) зменшується й при  $n \rightarrow \infty$  досягає граничної величини  $I_{\infty} = m^2 / R$ , що називається *границею серії*.

Закономірності лінійчастих спектрів атомів відображають їхню внутрішню будову, а також процеси, що відбуваються всередині атомів. Зокрема, особливості спектра атома водню лягли в основу теорії Бора для найпершого атома в таблиці Д.І. Менделєєва.

## § 4.2. Постулати Бора

• В 1913 р. датський фізик Н. Бор зробив спробу побудувати неklasичну теорію атома, поєднавши в єдине ціле емпіричні закономірності лінійчастих спектрів, ядерну модель атомів Резерфорда та квантовий характер випромінювання й поглинання, висунутий у свій час Планком. Теорія Бора поширюється не тільки на атом водню, але й на воднево-подібні системи, які складаються з ядра з зарядом  $+Ze$  та одного електрона, що обертається навколо нього [1,2,8]. Не відкидаючи в цілому класичного опису поведінки електрона в атомі, Бор доповнив його деякими обмеженнями на рух електронів. Ці обмеження були сформульовані у вигляді двох *постулатів*, тобто тверджень, які треба сприймати без доказів, як констатацію існуючого.

**1-й постулат Бора (про стаціонарні стани):** існують стаціонарні стани атома з дискретними значеннями енергії  $E_1, E_2, E_3, \dots$ , перебуваючи в яких він не випромінює енергію. Цим стаціонарним станам відповідає рух електрона по колових стаціонарних орбітах, для яких момент імпульсу електрона квантується згідно з *правилом квантування Бора*

$$L_n = m_e V r = n \cdot \hbar, \quad (4-3)$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$  - цілі числа,  $m_e$  - маса електрона,  $V$  - його швидкість,  $r$  - радіус орбіти,  $\hbar$  - стала Планка.



**2-й постулат Бора (правило частот):** при переході атома з одного стаціонарного стану в інший випускається або поглинається квант (фотон) з енергією

$$\hbar\omega = E_n - E_m. \quad (4-4)$$

Випромінювання відбувається при переході зі стану з більшою енергією в стан з меншою (перехід електрона з більш віддаленої орбіти на ближчу до ядра орбіту). Поглинання кванта має місце для протилежного переходу.

• Користуючись постулатами Бора, можна знайти радіуси стаціонарних орбіт та енергії в стаціонарних станах. Оскільки електрон рухається навколо ядра під дією кулонівської сили, то вона відіграє роль доцентрової сили, тобто

$$\frac{m_e V^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (4-5)$$

Підставивши величину швидкості  $V$  з (4-3), знайдемо радіуси орбіт для стаціонарних станів:

$$r_n = n^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Ze^2 m_e}. \quad (4-6)$$

Для першої стаціонарної орбіти в атомі водню ( $Z=1$ ,  $n=1$ ) дістаємо  $r_1 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , це – так званий *борівський радіус*. Радіуси інших стаціонарних орбіт електронів в атомі водню визначатимуться як  $r_n = n^2 \cdot r_1$ .

Повна енергія атома складається з кінетичної енергії руху електрона та його потенціальної енергії взаємодії з ядром, тобто

$$E = \frac{m_e V^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2}{r}. \quad (4-7)$$

Підставивши  $m_e V^2$  з рівняння (4-5) і радіус  $r_n$  з формули (4-6), для повної енергії атома в стаціонарних станах маємо

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}. \quad (4-8)$$

Для атома водню ( $Z=1$ ) схема енергетичних рівнів, що відповідають виразу (4-8), показана на рис.30.

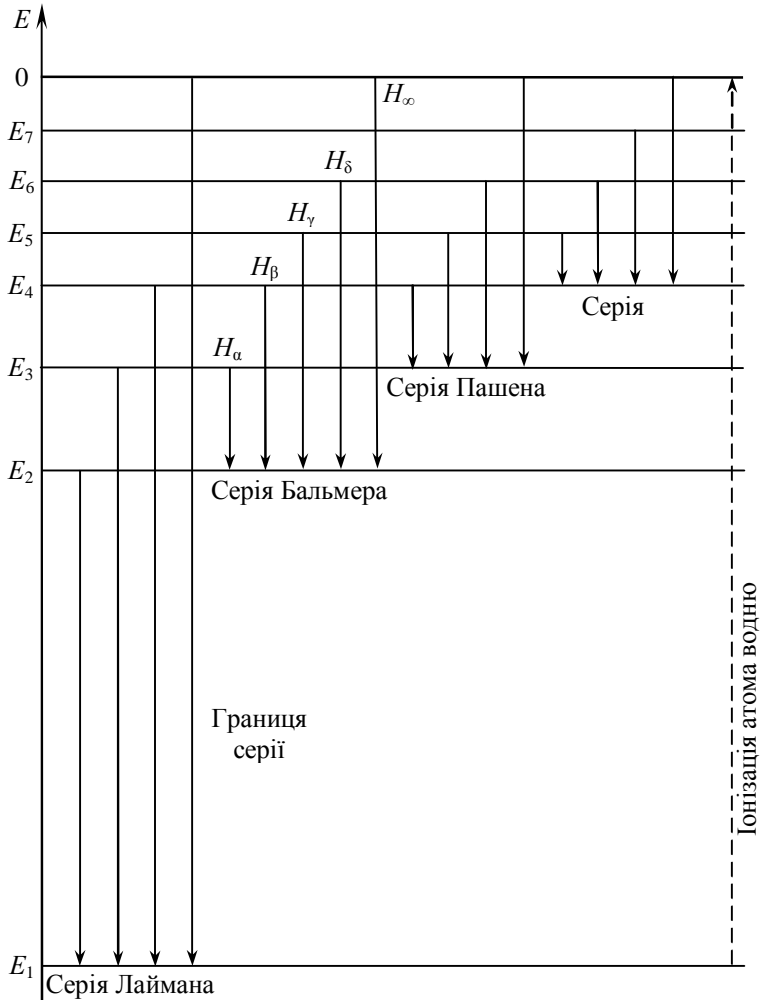


Рис.30

Стан атома з найменшою енергією ( $n=1$ ) називається *основним*. Для атома водню основному стану відповідає енергія  $E_1 = -13,53 \text{ eV}$ . Щоб усунути електрон з атома водню,

тобто іонізувати атом, потрібно електрон перевести з рівня  $E_1$  на рівень з енергією  $E=0$ . Як видно з рис.30, для цього потрібна енергія  $E_{ion}=15,53\text{ eV}$ , яку називають *енергією іонізації* атома водню. Відмітимо також, що при зростанні  $n$  енергетичні рівні розташовуються все густіше, а значення енергії атома наближається до нуля.

•Згідно з 2-м постулатом Бора (4-4) енергія кванта випромінювання при переході атома водню з більш високого енергетичного стану  $E_n$  в стан з меншою енергією  $E_m$ , враховуючи вираз (4-8), визначиться так:

$$hw = E_n - E_m = \frac{m_e e^4}{32p^2 e_0^2 \hbar^2} \cdot \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (4-9)$$

З цього рівняння знайдемо вираз для спектроскопічного хвильового числа:

$$n^* = \frac{1}{l} = \frac{n}{c} = \frac{w}{2pc} = \frac{m_e e^4}{64p^3 c e_0^2 \hbar^3} \cdot \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4-10)$$

де  $c$  – швидкість світла.

Формула (4-10) за своєю структурою подібна до виразу узагальненої формули Бальмера (4-2), а числове зачення виразу

$$R = \frac{m_e e^4}{64p^3 c e_0^2 \hbar^3} \quad (4-11)$$

дуже добре збігається з експериментально одержаним значенням сталої Рідберга.

•Теорія Бора для атома водню змогла досить точно пояснити лінійчастий спектр випромінювання, привела до розуміння змісту цілих чисел в узагальненій формулі Бальмера, давала правильну величину сталої Рідберга. Цікаво також зауважити, що ціле число  $n$  в 1-му постулаті Бора (4-3) дорівнює кількості довжин хвиль де Бройля (2-1) для електрона, що укладаються на довжині колової орбіти. Дійсно, на підставі вказаних формул маємо

$$n = \frac{m_e V r}{\hbar} = \frac{p \cdot 2\pi r}{h} = \frac{2\pi r}{l}. \quad (4-12)$$

Однак теорія Бора неспроможна пояснити цілий ряд інших фактів, що стосуються властивостей атома водню. Вона виявилась зовсім непридатною для пояснення будови багатоелектронних атомів, починаючи з атома гелію, що безпосередньо йде за атомом водню й має два електрони.

Основний недолік теорії Бора полягає в тому, що вона є непослідовною ні з огляду класичної електродинаміки, ані з квантових позицій. Штучне введення квантових постулатів не відображає якихось єдиних універсальних підходів до всіх явищ мікросвіту. Тим не менше, теорія Бора була перехідним етапом і відіграла важливу роль на шляху створення сучасної квантової механіки.

### § 4.3. Атом водню в квантовій механіці

•Розглянемо, який результат для атома водню впливає при застосуванні до нього квантово-механічного підходу. Згідно з сучасними уявленнями атом водню складається з позитивно зарядженого протона (ядра) та негативно зарядженого електрона, причому за абсолютною величиною ці заряди однакові й дорівнюють  $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$ . Розміри атома мають величину  $\sim 10^{-10} \text{ м}$ , а ядра – приблизно  $10^{-14} \dots 10^{-15} \text{ м}$ , тобто електронна оболонка атома займає набагато більший об'єм, ніж ядро. Оскільки протон у 1836 разів важчий за електрон, можна вважати, що протон нерухомий, а електрон рухається навколо нього, утримуваний кулонівськими силами. Потенціальна енергія кулонівської взаємодії електрона й протона залежить від відстані  $r$  між ними:

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}. \quad (4-13)$$

Таким чином, електрон в атомі знаходиться ніби в лійкопо-

дібній потенціальній ямі (рис.31), стінки якої задаються виразом (4-13).

Кулонівське поле ядра, в якому рухається електрон, є центрально-симетричним, тобто має сферичну симетрію, тому в подальшому доцільно перейти до сферичної системи координат. На рис.32 зображена система сферичних координат, де  $r$  - радіус,  $q$  - полярний кут (широта),  $j$  - азимут (довгота).

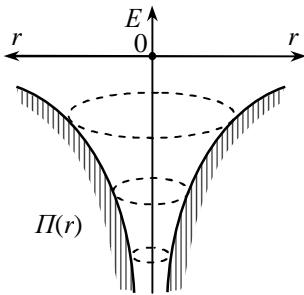


Рис.31

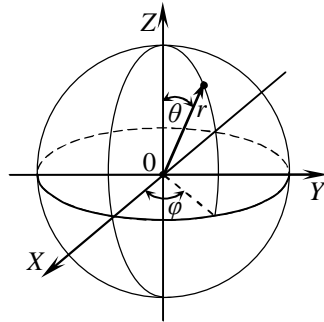


Рис.32

Стационарне рівняння Шредінгера (3-7) для електрона в атомі водню запишеться так:

$$\Delta_{rqj} \psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0, \quad (4-14)$$

де  $\Delta_{rqj}$  - оператор Лапласа, представлений у сферичних координатах. Використання сферичних координат має ту перевагу, що рівняння (4-14) розпадається на окремі рівняння, одне з яких залежить тільки від радіуса  $r$ , а друге – тільки від кутів  $q$  і  $j$ .

• Розв'язання рівняння Шредінгера (4-14) є доволі складною математичною процедурою [5, 10], тому наведемо тільки кінцеві результати.

Виявляється, що рівняння Шредінгера (4-14) має розв'язки при будь-яких позитивних значеннях повної енергії  $E > 0$ , а

також при *дискретних* від'ємних значеннях  $E$ , які визначаються формулою

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{m_e e^4}{32 p^2 e_0^2 \hbar^2}, \quad (4-15)$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$  - цілі числа. Оскільки розглядається перебування електрона в атомі, а не за його межами, то саме формула (4-15) дає **власні значення** енергії електрона в атомі водню. Цікаво відмітити, що результат (4-15) збігається з результатом для енергії електрона (4-8) в теорії Бора, причому без формулювання будь-яких постулатів, а як логічний результат розв'язання рівняння Шредінгера.

Параметр  $n$  у формулі (4-15) називається **головним квантовим числом**. Воно визначає дискретний ряд значень повної енергії електрона в атомі. Повна енергія  $E$  виявилась від'ємною через те, що за нульовий рівень береться енергія взаємодії електрона з ядром на відстані  $r \rightarrow \infty$ . Енергію електрона схематично зображують у вигляді енергетичних рівнів (рис.33). Чим більше число  $n$ , тим вище розташований

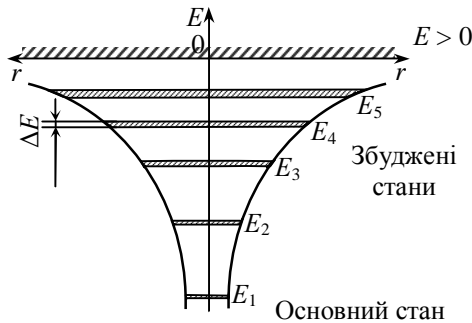


Рис.33

енергетичний рівень, причому відстані між рівнями зменшуються. Рівень з  $n = 1$  називається **основним станом**, а рівні з  $n > 1$  - **збудженими станами**. Атом може перейти з одного стану в інший, якщо він поглинає або випромінює квант енергії електромагнітного випромінювання, який точно до-

рівнює різниці між енергетичними рівнями, тобто

$$\hbar n = E_n - E_m. \quad (4-16)$$

Час життя атома  $\Delta t$  в основному стані нескінченно великий, у збудженому ж стані він дорівнює  $\sim 10^{-8} \text{ с}$ . Тоді згідно з співвідношеннями невизначеностей  $\Delta E \cdot \Delta t > \hbar/2$  маємо, що для основного стану ширина рівня  $\Delta E = 0$ , а для збуджених станів  $\Delta E$  - скінченна величина. Оскільки для станів з більшими  $n$  час життя, як правило, зменшується, то ширина рівнів зростає.

• При розв'язанні рівняння Шредінгера для одновимірної задачі власні  $Y$ -функції визначались одним цілочисловим параметром  $n$  (див. формулу (3-17) і в цілому § 3.3). У випадку атома водню маємо 3-вимірну задачу, тому власні  $Y$ -функції визначаються трьома цілочисловими параметрами  $n$ ,  $l$  та  $m$ . Крім того, власні функції рівняння (4-14) в сферичних координатах можна представити у вигляді добутку двох функцій, одна з яких залежить тільки від радіуса  $r$ , а друга – тільки від кутів  $q$  та  $j$ , тобто

$$Y_{nlm}(r, q, j) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(q, j), \quad (4-17)$$

де  $n$  – називається *головним квантовим числом*,  $l$  – *азимутальним* (або *орбітальним*) і  $m$  – *магнітним квантовими числами*. Детальний розгляд фізичного змісту квантових чисел буде зроблений трохи згодом (див. § 4.4).

Як приклад наведемо декілька перших радіальних хвильових функцій [5]:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} \cdot \exp(-r/a), \quad (*)$$

$$R_{20}(r) = \frac{2}{(2a)^{3/2}} \cdot \exp(-r/2a) \cdot (1 - r/2a),$$

$$R_{21}(r) = \frac{2}{[3(2a)^3]^{1/2}} \cdot \exp(-r/2a) \cdot (r/2a),$$

$$R_{30} = \frac{2}{(3a)^{3/2}} \cdot \exp(-r/3a) \cdot [1 - 2 \cdot (r/3a) + (2/3) \cdot (r/3a)^2],$$

де  $a \equiv r_1 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , тобто дорівнює радіусу 1-ї борівської орбіти.

Наведемо також декілька сферичних функцій, що входять у вираз (4-17) [5]:

$$Y_{00}(q, j) = \frac{1}{\sqrt{4p}}, \quad (**)$$

$$Y_{10}(q, j) = \sqrt{\frac{3}{4p}} \cdot \cos q,$$

$$Y_{1,\pm 1}(q, j) = m \sqrt{\frac{3}{8p}} \cdot \sin q \cdot e^{\pm ij},$$

$$Y_{22}(q, j) = \sqrt{\frac{15}{32p}} \cdot \sin^2 q \cdot e^{2ij}.$$

Як бачимо, математичний вигляд формул (\*) та (\*\*) досить складний.

• Згідно з правилами квантової теорії ймовірність знаходження електрона в об'ємі  $dV$  дорівнює  $|y|^2 dV$ . Елементарний об'єм  $dV$  в сферичних координатах має такий вигляд:

$$dV = r^2 dr \cdot \sin q \cdot dq \cdot dj. \quad (4-18)$$

Тоді ймовірність перебування електрона в елементарному об'ємі поблизу точки з координатами  $r$ ,  $q$  і  $j$  з урахуванням (4-17) запишеться так:

$$dP(r, q, j) = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \cdot |Y_{lm}(q, j)|^2 \sin q \cdot dq \cdot dj. \quad (4-19)$$

В цьому виразі величина  $|R_{nl}(r)|^2 r^2$  визначає *густину ймовірності* знайти електрон на відстані  $r$  від ядра, тобто  $dP/dr$ . На рис.34 (а, б) наведені графіки розподілу електронної густини від відстані до ядра залежно від квантових чисел  $n$  та  $l$ . Цікаво відмітити, що для станів з квантовими числами  $n$  і  $l$  (1 і 0), (2 і 1), (3 і 2) максимумами електронної густини знаходяться на відстанях, що відповідають радіусам 1-ї, 2-ї



та 3-ї борівських орбіт (рис.34,а). Для станів з іншими квантовими числами картина розподілу дещо складніша.

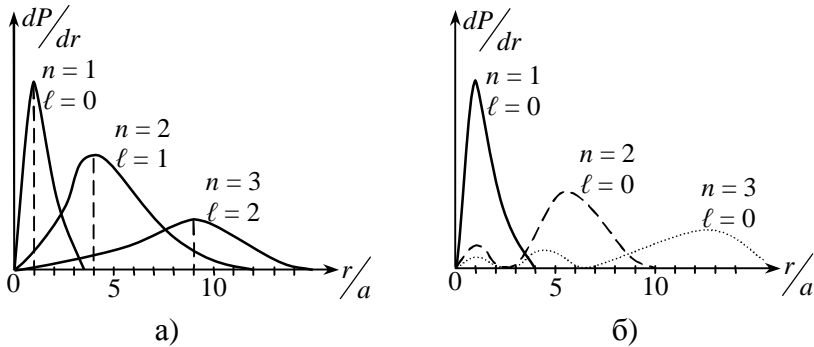


Рис.34

У виразі (4-19) величина  $|Y_{lm}(q, j)|^2$  є густиною ймовірності знайти електрон у напрямку кутів  $q$  і  $j$ . Виявляється, що кутовий розподіл густини ймовірності не залежить від кута  $j$ , тобто має місце симетрія обертання навколо осі  $z$ . На рис.35 представлені полярні діаграми для  $|Y_{lm}(q, j)|^2$  залежно від квантових чисел  $l$  і  $m$ .

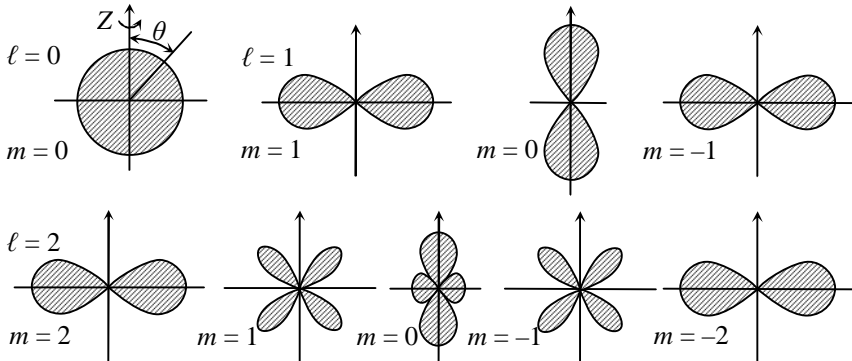


Рис.35

Таким чином, електрон в атомі представляється у вигляді *електронної хмарки*, тобто просторової області, в кожній точці якої він перебуває з певною ймовірністю. Форми елек-

тронних хмаринок залежать від квантових чисел  $l$  та  $m$  і утворюються обертанням фігур на рис.35 навколо осі  $z$ , при цьому ймовірність перебування електрона на відстані  $r$  залежить від квантових чисел  $n$  та  $l$  і визначається розподілами, які представлені на рис.34.

При збудженні атома витрачається енергія якраз на перебудову його електронної хмарки. Кожній формі хмарки відповідає свій певний енергетичний стан електрона в атомі. При переході з одного стану в інший атом випускає або поглинає строго відміряну кількість енергії - квант  $h\nu$ .

#### § 4.4. Квантові числа

•Розв'язки (4-17) рівняння Шредінгера для атома водню залежать від цілочислових параметрів  $n$ ,  $l$ ,  $m$ , які називаються **квантовими числами**. Фізичний зміст квантових чисел пов'язується з характеристиками стану руху електрона [1, 8].

Квантове число  $n$  називається **головним**. Згідно з формулою (4-15) воно визначає дискретний ряд значень повної енергії електрона в атомі водню. Головне квантове число може набирати такі значення:  $n = 1, 2, 3, \dots$ .

В квантовій механіці доведено, що **азимутальне** (або **орбітальне**) квантове число  $l$  визначає дискретний ряд орбітальних моментів імпульсу електрона:

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l \cdot (l + 1)}, \quad (4-20)$$

причому при даному  $n$  квантове число  $l$  набирає такі значення:  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ . Якщо уявляти орбітальний рух електрона як класичної зарядженої частинки, то момент імпульсу

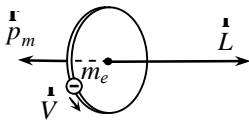


Рис.36

$\vec{L} = [\vec{r}, m\vec{V}]$  і магнітний момент  $\vec{\mu}_m$  можна представити, як показано на рис.36.

Число  $m$  називається **магнітним** квантовим числом, воно визначає дискретний ряд значень проекції орбітального моменту імпульсу  $\vec{L}$  на виділений напрям  $Z$  у просторі, тобто умови просторового квантування:

$$L_z = m\hbar. \quad (4-21)$$

Для азимутального числа  $l$  магнітне квантове число може мати такі значення:  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ , тобто  $2l+1$  значень.

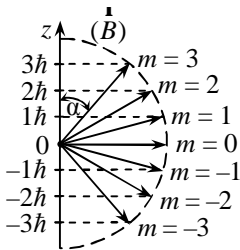


Рис.37

Виділений напрям у просторі пов'язують, наприклад, зі створенням магнітного поля  $\vec{B}$ . На рис.37 схематично зображені можливі просторові орієнтації вектора  $\vec{L}$ , коли азимутальне квантове число  $l = 3$ .

• Енергія електрона в атомі водню залежить тільки від головного квантового числа  $n$  згідно з (4-15) і не залежить від квантових чисел  $l$  і  $m$ . Це означає, що електрон в атомі водню може мати одне й те саме значення енергії, але перебувати в дещо різних станах, які відрізняються величиною орбітального моменту імпульсу та його орієнтацією в просторі. Стани з однаковою енергією називаються **виродженими**, а їх кількість – **кратністю виродження**. Кратність виродження енергетичного стану з певним квантовим числом  $n$  становить

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (4-22)$$

На рис.38 представлена схема енергетичних рівнів атома водню. На ній показано виродження рівнів частково, оскільки кожному квантовому числу  $l$  ще відповідає  $2l+1$  значень магнітного квантового числа  $m$ . Стани електронів прийнято записувати у вигляді символів, де цифра вказує головне квантове число, а літера – азимутальне квантове число  $l$ , на-

приклад, 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f і т.д.

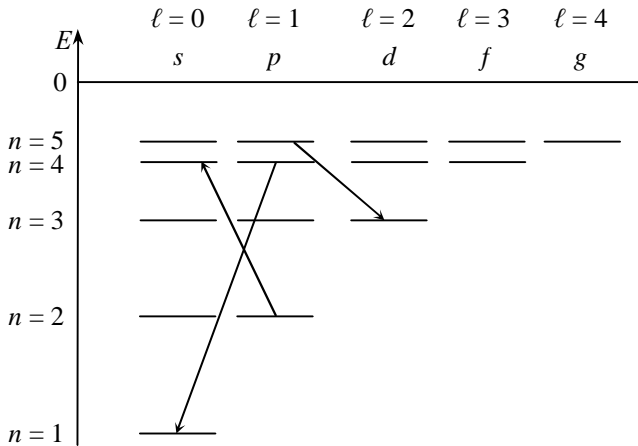


Рис.38

Випускання і поглинання квантів енергії відбувається при переходах між рівнями, для яких виконується правило добору за квантовим числом  $l$ :

$$\Delta l = \pm 1. \quad (4-23)$$

Це пояснюється тим, що сам фотон має власний момент імпульсу, тому при випусканні або поглинанні фотона змінюється стан електрона в атомі. Правило добору (4-23) є проявом фундаментального закону – закону збереження моменту імпульсу.

•Подальше вивчення властивостей квантових систем призвело до відкриття *власного* руху електрона. Дослідження спектрів атомів за допомогою приладів з великою роздільною здатністю дозволило виявити тонку структуру спектральних ліній, тобто їх розщеплення на ряд близьких ліній. Це означало, що насправді енергетичні рівні електронів в атомі складаються з ряду близьких підрівнів, що не впливало з рівняння Шредінгера [1, 2, 3, 8].

Для пояснення цього факту Дж. Уленбек і С. Гаудсміт (1925 р.) висунули гіпотезу про те, що електрон має *власний*

момент імпульсу  $\vec{L}_s$ , який було названо **спіном**. Така назва походить від англійського **to spin** – “обертатися”. Згідно з гіпотезою вважалось, що власний момент імпульсу  $\vec{L}_s$  зумовлений обертанням електрона як зарядженої кульки навколо власної осі, крім того, виникає ще власний магнітний момент електрона  $\vec{p}_{ms}$  (рис.39). Однак від такої моделі прийшлося скоро відмовитись, оскільки при подібному обертанні швидкість на “екваторі” електрона мала б бути в ~200 разів більше швидкості світла [8], що суперечить спеціальній теорії відносності. Крім того, за цією моделлю гіромагнітне відношення (тобто  $p_{ms}/L_s$ ) давало розбіжності з експериментом. Згідно з сучасними уявленнями спін треба вважати невід’ємною властивістю електрона, такою як його заряд або маса.

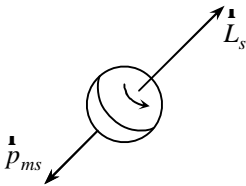


Рис.39

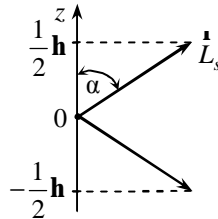


Рис.40

Величина власного моменту імпульсу електрона визначається за загальними формулами квантової механіки так:

$$|\vec{L}_s| = \hbar \sqrt{s \cdot (s + 1)}, \quad (4-24)$$

де  $s = \frac{1}{2}$  - **спінове** квантове число.

Аналогічно просторовому квантуванню орбітального моменту імпульсу (4-22) має місце просторове квантування для спіна, згідно з яким проекція  $\vec{L}_s$  на виділений напрям  $z$  визначається як

$$L_{sz} = m_s \hbar, \quad (4-25)$$

де  $m_s = \pm s$ , тобто  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  (це квантове число іноді назива-

ють *магнітним спіновим*). Таким чином, електрон може мати дві орієнтації спіна – в напрямку або проти поля (рис.40).

Отже, для повної характеристики стану електрона в атомі потрібно знати чотири квантових числа:  $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $m_s$ .

Наявність спіна у мікрочастинок не впливає з рівняння Шредінгера. Однак ця характеристика автоматично одержується з релятивістського рівняння квантової механіки, встановленого П.Діраком.

#### § 4.5. Багатоелектронні атоми. Принцип Паулі

•Всі атоми, крім водню, мають більше одного електрона. Кількість електронів в атомі відповідає номеру хімічного елемента в таблиці Д.І.Менделєєва.

У багатоелектронному атомі потенціальна енергія електрона визначається його взаємодією з ядром і рештою електронів атома. Ця обставина призводить до того, що математичний вираз для потенціальної енергії значно ускладнюється порівняно з атомом водню (4-13). У свою чергу, це значно ускладнює рівняння Шредінгера, так що точне розв'язання його, тобто винайдення відповідних власних значень енергії  $E$  та  $u$ -функцій, стає неможливим. Однак на підставі деяких загальних висновків квантової механіки можна одержати основні уявлення про стан електронів у багатоелектронних атомах.

В § 4.4 було відмічено, що електронні стани в атомі водню є виродженими. В багатоелектронних атомах ( $Z > 1$ ) відбувається зняття виродження, тобто енергія електрона залежить не тільки від головного квантового числа  $n$ , але й від інших квантових чисел. З'ясуємо, чому це так.

По-перше, в атомах відбувається перетинання електронних хмаринок різних електронів. Енергія кулонівської взаємодії між електронами залежить від форми електронних хмаринок. Оскільки форма електронної хмаринки визнача-

ється квантовими числами  $n$  і  $l$ , то й енергія електрона в багатоелектронному атомі залежить не тільки від  $n$ , а й від  $l$ , тобто знімається виродження по азимутальному квантовому числу  $l$ .

По-друге, в атомах має місце магнітна взаємодія електрона з магнітним полем, яке створюється іншими електронами атома. Справа в тім, що кожний електрон має орбітальний  $\vec{p}_m$  і спіновий  $\vec{p}_{ms}$  магнітні моменти, які напрямлені протилежно відповідним орбітальному  $\vec{L}$  та спіновому  $\vec{L}_s$  моментам імпульсу (див. рис.36 і 39).

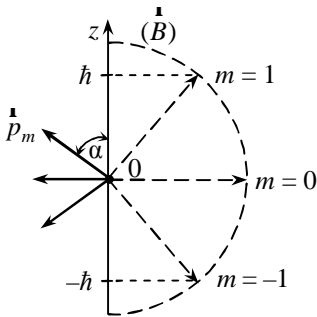


Рис.41

приклад просторового квантування для орбітальних моментів  $\vec{L}$  та  $\vec{p}_m$  для квантового числа  $l = 1$ , коли згідно з формулою (4-21) магнітне квантове число  $m = -1, 0, 1$ . При взаємодії магнітних моментів електронів з магнітним полем з'являється додаткова енергія

$$W_m = -\vec{p}_m \cdot \vec{B} = -p_m B \cdot \cos a, \quad (4-26)$$

де  $a$  - кут між векторами магнітної індукції  $\vec{B}$  та магнітного моменту  $\vec{p}_m$ . Оскільки кут  $a$  визначається магнітним квантовим числом  $m$ , то й енергія електрона залежить від  $m$ , тобто знімається виродження по  $m$ .

По-третє, енергія електрона залежить від орієнтації спіна  $\vec{L}_s$  і зв'язаного з ним магнітного моменту  $\vec{p}_{ms}$ , що призводить до залежності енергії електрона й від спінового квантового числа  $m_s$ .

Отже, в багатоелектронному атомі енергія електрона залежить від усіх квантових чисел  $n, l, m, m_s$ , тобто знімається

виродження по всіх чотирьох квантових числах. Схема енергетичних рівнів електронів при знятті виродження по квантових числах  $l$  та  $m$  показана на рис 42.

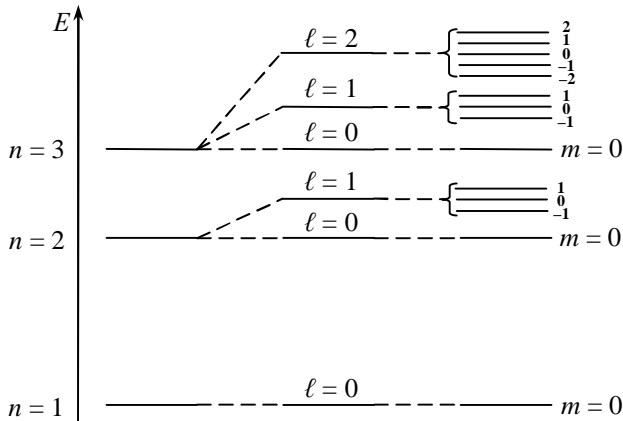


Рис.42

•Тепер перейдемо до розгляду питання про те, як розміщуються електрони складного атома по енергетичних рівнях.

Згідно з класичними уявленнями всі електрони мали б розташовуватись на найнижчому рівні в основному стані атома. Однак це не так [4]. Робота, яку треба виконати, щоб іонізувати атом у *незбудженому стані*, дорівнює енергії, що витрачається на переведення електрона з найнижчого енергетичного рівня на рівень  $E = 0$ . Наприклад, для іонізації атома водню потрібно виконати роботу  $15,53 \text{ eV}$  (див. рис.30). Якби всі електрони незбудженого багатоелектронного атома перебували на одному найнижчому рівні, то для іонізації цього атома існувало б тільки одне значення роботи іонізації. Дослід, однак, засвідчує, що робота з виривання електрона з атома (за винятком атомів водню і гелію) набуває певної кількості різних значень, яка зростає зі збільшенням порядкового номера  $Z$  хімічного елемента. Саме вивчення спектрів



багатоелектронних атомів привело швейцарського фізика В.Паулі в 1925 р. до відкриття істотно нового фундаментального закону квантової механіки, що одержав назву **принципу Паулі**:

*в атомі (або будь-якій квантовій системі) не може бути двох електронів, що мають однакову сукупність усіх чотирьох квантових чисел  $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $m_s$ .*

Іншими словами, в одному й тому ж квантовому стані не можуть перебувати одночасно два електрони. Стосовно до електронів в атомі принцип Паулі можна записати так [8]:

$$Z_1(n, l, m, m_s) = 0 \quad \text{або} \quad 1, \quad (4-27)$$

де  $Z_1$  - кількість електронів у стані з квантовими числами  $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $m_s$ .

Кількість можливих квантових станів в атомі, які мають однаковий набір трьох квантових чисел  $n$ ,  $l$ ,  $m$ , дорівнює двом, оскільки спінове квантове число може набирати два значення  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ , тобто

$$Z_2(n, l, m) = 2. \quad (4-28)$$

Кількість можливих квантових станів (а значить, й електронів) в атомі з однаковими квантовими числами  $n$  і  $l$  дорівнює

$$Z_3(n, l) = 2 \cdot (2 \cdot l + 1), \quad (4-29)$$

оскільки при фіксованому  $l$  магнітне квантове число  $m$  може набирати  $2l + 1$  значень, а  $m_s$  - два значення.

Нарешті, кількість електронів в атомі, що перебувають у станах з однаковим головним квантовим числом  $n$ , дорівнює

$$Z(n) = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2, \quad (4-30)$$

оскільки при фіксованому  $n$  квантове число  $l = 0, 1, \dots, n - 1$ .

•Сукупність електронів в атомі, що мають однакове значення головного квантового числа  $n$ , утворюють так зва-

ний **електронний шар** (або **оболонку**), в якому можуть знаходитись  $2n^2$  електронів. Електронні шари прийнято позначати великими латинськими літерами K, L, M, N, O, що відповідає значенням  $n = 1, 2, 3, 4, 5$ .

Сукупність електронів, що мають однакові значення квантових чисел  $n$  і  $l$ , утворюють **електронну підоболонку**, в якій може міститися  $2(2l + 1)$  електронів. Підоболонки, що складають електронний шар, можуть не бути просторово розділені, вони можуть перетинатися.

В таблиці, що наводиться нижче, представлено розподіл електронів по різних підоболонках і шарах на підставі формул (4-29) та (4-30).

$n$	Шар	Кількість електронів у підоболонці $Z(n, l)$					Кількість електронів у шарі $Z(n)$
		$s$ ( $l=0$ )	$p$ ( $l=1$ )	$d$ ( $l=2$ )	$f$ ( $l=3$ )	$g$ ( $l=4$ )	
1	K	2	—	—	—	—	2
2	L	2	6	—	—	—	8
3	M	2	6	10	—	—	18
4	N	2	6	10	14	—	32
5	O	2	6	10	14	18	50

Підоболонки в атомах прийнято позначати цифрою, що відповідає номеру шару  $n$ , і малою латинською літерою відповідно до квантового числа  $l$ , наприклад,  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s$  і т.д.

Електрони в атомі повинні займати в першу чергу найнижчі енергетичні рівні. Однак вони **всі не можуть** розміститися на найнижчому рівні, оскільки це протирічить принципу Паулі. Спочатку заповнюється підоболонка з меншим значенням  $n$ , а потім з більшим. В межах електронного шару спочатку заповнюється підоболонка з меншим значенням  $l$ , відтак з більшим. Існує також **правило О. Маделунга**:

послідовність заповнення електронних підоболонки відбувається відповідно до зростання суми  $(n + l)$  [2]. Хоча це правило не є універсальним, у багатьох випадках ним зручно користуватись.

#### § 4.6. Періодична система елементів Д.І. Менделєєва

•Якщо хімічні елементи розташувати в порядку зростання атомних мас (за деякими винятками), то через певні інтервали повторюються їхні хімічні та фізичні властивості. Ця емпірична закономірність була вперше встановлена російським вченим Д.І.Менделєєвим у 1869 р. На той час були відомі всього 64 хімічних елементи. Розташовуючи елементи відповідно до періодів повторюваності їхніх властивостей, Менделєєв одержав таблицю, в якій залишилось чимало порожніх клітин. Відмовившись від принципу зростання атомних мас, він увів поняття *порядкового номера* хімічного елемента. Менделєєву вдалось на підставі відкритого ним **періодичного закону** передбачити ряд нових хімічних елементів, описати їхні властивості, уточнити маси деяких відомих елементів. Згодом ці передбачення чудово підтвердились.

Таблиця, в якій елементи представлені розбитими на періоди й групи так, що наочно видно повторюваність їхніх властивостей, одержала назву *періодичної системи елементів Д.І.Менделєєва*. На теперішній час періодична таблиця елементів набула вигляду, як представлено на с. 206...207 (атомні маси подані заокругленими до трьох значущих цифр).

Однак, будучи одним з найважливіших законів природи, періодичний закон Менделєєва довгий час не мав теоретичного обґрунтування. Тільки з розвитком квантової механіки стала зрозумілою причина періодичної повторюваності хімічних і фізичних властивостей елементів [1, 2, 5, 8].

•Квантова теорія періодичної системи ґрунтується на

таких положеннях:

- 1) порядковий номер  $Z$  хімічного елемента дорівнює кількості електронів в атомі;
- 2) розміщення електронів в атомі по енергетичних рівнях повинно задовольняти мінімум енергії;
- 3) заповнення електронами енергетичних станів повинно відбуватися згідно з принципом Паулі.

Розглянемо будову електронних оболонок атомів і, виходячи з цього, порівняємо їхні хімічні та фізичні властивості. Кожний наступний атом будемо одержувати, збільшуючи заряд ядра на одиницю (елементарний заряд) і додаючи один електрон у дозволений квантовий стан, що має мінімальну енергію.

Атом **водню** ( $Z=1$ ) має один електрон з довільною орієнтацією спіна ( $m_s = \pm 1/2$ ), який повинен зайняти найнижчий енергетичний стан з квантовими числами  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $m = 0$ . Умовний запис цього стану -  $1s$  - називають **електронною конфігурацією**, яка характеризує розподіл електронів по квантових станах в атомі. На рис. 43 цей електрон в підоболонці  $1s$  зображений стрілочкою.

1 період групи		2 період групи								
I	II	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	
						↑	↑↓	↑	↑↓	$m = 1$
						↑	↑↓	↑↓	↑↓	$m = 0$
				↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	$m = 1$
		↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	2p
										2s
↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	1s
<b>H</b> $Z=1$	<b>He</b> $Z=2$	<b>Li</b> $Z=3$	<b>Be</b> $Z=4$	<b>B</b> $Z=5$	<b>C</b> $Z=6$	<b>N</b> $Z=7$	<b>O</b> $Z=8$	<b>F</b> $Z=9$	<b>Ne</b> $Z=10$	

Рис.43

Наступний елемент – **гелій** – має два електрони. Вони обидва можуть знаходитись у стані  $1s$ , але повинні відрізнятись орієнтацією спіна. На рис.43 це відображено протилежним напрямом стрілочок. Електронна конфігурація гелію записується як  $1s^2$ . В атомі гелію К-шар повністю забудований, цей елемент є інертним газом, він завершує короткий 1-й період таблиці елементів Д.І.Менделєєва.

**Літій** починається 2-й період таблиці Менделєєва. Третій електрон літію згідно з принципом Паулі може розміститися в стані  $2s$ , тому повна електронна конфігурація має вигляд  $1s^2 2s$ . Літій є представником лужних металів, його третій електрон слабо зв'язаний з атомом і легко може переходити до інших елементів у хімічних сполуках, валентність літію дорівнює 1. Цей валентний електрон також визначає фізичні властивості (електропровідність, потенціал іонізації, оптичний спектр тощо).

У **берилію** повністю заповнюється підоболонка  $2s$ , його електронна конфігурація має вигляд  $1s^2 2s^2$ . П'ятий електрон **бору** розташовується вже в підоболонці  $2p$ , його електронна конфігурація запишеться так:  $1s^2 2s^2 2p$ . У наступних хімічних елементів заповнюється підоболонка  $2p$ , тому електронні конфігурації матимуть такий вигляд:

**вуглець** -  $1s^2 2s^2 2p^2$ , **азот** -  $1s^2 2s^2 2p^3$ , **кисень** -  $1s^2 2s^2 2p^4$ , **фтор** -  $1s^2 2s^2 2p^5$ , **неон** -  $1s^2 2s^2 2p^6$ . Елемент фтор є галогеном, це дуже активний хімічний елемент, який здатний приєднувати до себе електрон у хімічних сполуках. У неону завершується заповнення L-шару, тому утворюється стійка система, цей хімічний елемент є інертним газом, який практично не вступає в хімічні взаємодії з іншими елементами. Неоном завершується 2-й період таблиці Менделєєва.

Третій період таблиці починається з **натрію** ( $Z=11$ ), заповнюється підоболонка  $3s$ , повна електронна конфігурація

цього елемента  $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ . Натрій, як і літій, теж є лужним металом. У наступних елементів (див. табл. на с. 206...207) йде послідовна забудова підоболонки  $3s$  і  $3p$ . У **аргону** ( $Z=11$ ) забудована повністю  $3p$  підоболонка, це знову інертний газ. Повна електронна конфігурація аргону -  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ . Цей хімічний елемент завершує 3-й період таблиці Менделєєва.

• Ідеальне заповнення підоболонки відповідно до зростання квантових чисел  $n$  і  $l$  зберігається тільки для легких атомів від водню до аргону включно. Починаючи з **калію** ( $Z=19$ ), ця послідовність заповнення шарів і підоболонки порушується внаслідок зростання взаємодії між електронними хмарами. Взаємодія між електронами призводить до того, що для достатньо великих чисел  $n$  і малих чисел  $l$  енергетичні рівні лежать нижче, ніж для менших  $n$  і більших  $l$ . Так, згідно з правилом Маделунга (див. § 4.5) стан з  $n = 4$  і  $l = 0$  (сума  $n + l = 4$ ) є енергетично більш вигідним, ніж стан з  $n = 3$  і  $l = 2$  (сума  $n + l = 5$ ), що відображено на рис. 44.

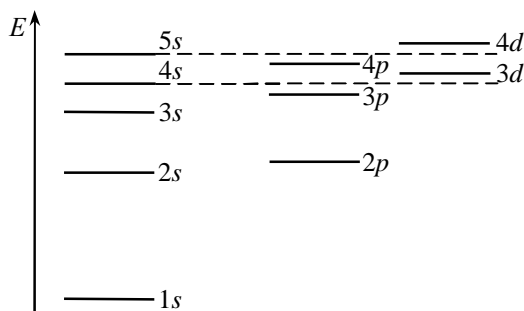


Рис. 44

Вже для атома **калію** після підоболонки  $3p$  заповнюється не  $3d$ , а підоболонка  $4s$ . Його повна електронна конфігурація має такий вигляд:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$ . Часто замість

повного запису конфігурації обмежуються записом стану валентних електронів. Для калію це буде запис  $4s$ . Калієм починається 4-й період таблиці Менделєєва. У **кальцію** ( $Z=20$ ) валентні електрони знаходяться в стані  $4s^2$ .

Починаючи від **скандію** ( $Z=21$ ) і до **міді** ( $Z=29$ ) заповнюється внутрішня підоболонка  $3d$ . Далі, до **криптону** ( $Z=36$ ) відбувається послідовне заповнення підоболонки  $4p$ , це теж інертний газ, його конфігурація записується так:  $3d^{10}4s^24p^6$ . Криптон завершує 4-й період.

**Рубідій** ( $Z=37$ ) розпочинає 5-й період таблиці, це лужний метал, його валентний електрон знаходиться в стані  $5s$ . **Стронцій** ( $Z=38$ ) має конфігурацію  $5s^2$ . Починаючи від **ітрію** ( $Z=39$ ) і до **паладію** ( $Z=46$ ) йде забудова внутрішньої підоболонки  $4d$ , причому тут можливі переходи електронів між станами  $4p$  і  $5s$ . Починаючи від **індію** ( $Z=49$ ) і до **ксенону** ( $Z=54$ ) відбувається забудова підоболонки  $5p$ . Цим інертним газом завершується 5-й період таблиці Менделєєва.

**З цезію** ( $Z=55$ ) розпочинається 6-й період таблиці, це знову лужний метал, його валентний електрон буде в стані  $6s$ . За ним йде **барій** ( $Z=56$ ), валентні електрони в стані  $6s^2$ . Далі йдуть так звані *лантаноїди*. Це елементи від **лантану** ( $Z=57$ ) до **лютецію** ( $Z=71$ ), які мають близькі хімічні й фізичні властивості. Справа в тім, що у **лантану** електронна конфігурація має вигляд  $5d6s^2$ , причому внутрішня підоболонка  $4f$  є зовсім незаповненою. В елементів від **церію** ( $Z=58$ ) до **лютецію** ( $Z=71$ ) йде заповнення внутрішньої підоболонки  $4f$ , тоді як зовнішня підоболонка  $6s$  залишається без змін. Починаючи від **гафнію** ( $Z=72$ ) відбувається забудова підоболонки  $5d$ , яка завершується у **золота** ( $Z=79$ ). У **ртуті** ( $Z=80$ ) повністю заповнені стани  $6s$ , а починаючи від **талію** ( $Z=81$ ) і до **радону** ( $Z=86$ ) заповнюються стани  $6p$ . Цим інертним газом завершується 6-й період таблиці Менделєєва.

Розпочинає 7-й період таблиці лужний метал **францій** ( $Z=87$ ), валентний електрон якого знаходиться в стані  $7s$ . Далі йде **радій** ( $Z=88$ ), у якого конфігурація -  $7s^2$ . Група елементів, що розпочинаються від **актинію** ( $Z=89$ ) і аж до **лоуренсію** ( $Z=103$ ), називається *актиноїдами*. В актиноїдів йде заповнення внутрішньої підоболонки  $5f$ , а зовнішні підоболонки, де знаходяться валентні електрони, є подібними. У наступних елементів відбувається поступова забудова підоболонки  $6d$ .

- Аналіз розподілу електронів по квантових станах в атомі показує, що періодичність хімічних і фізичних властивостей елементів пояснюється повторюваністю електронних конфігурацій у зовнішніх підоболонках і шарах. Наприклад, лужні метали, що входять у I групу, мають один електрон в  $s$ - стані, який і зумовлює хімічну активність цих елементів: у літію -  $2s$ , натрію -  $3s$ , калію -  $4s$ , рубідію -  $5s$  і т.д.

У галоїдів для завершення забудови підоболонок бракує одного електрона. Вони спроможні захоплювати електрон при хімічних реакціях. Електронна конфігурація зовнішніх підоболонок має такий вигляд: у фтору -  $2s^2 2p^5$ , хлору -  $3s^2 3p^5$ , бром -  $4s^2 4p^5$  і т.д.

У інертних газів (гелій, неон, аргон, криптон і т.д.) підоболонки  $p$  виявляються повністю забудованими, що створює стійку систему, тому ці елементи хімічно неактивні.

Кожний період таблиці елементів починається з лужних металів і закінчується інертними газами. Так звані великі періоди таблиці містять перехідні елементи: 4-й період – Fe, Co, Ni; 5-й період – Ru, Rh, Pd; 6-й – Os, Ir, Pt. Ці елементи між собою мають близькі фізико-хімічні властивості. Валентність елементів перехідних груп є змінною через можливість переходу зовнішніх (валентних) електронів на внутрішні електронні підоболонки. Це призводить до того, що фізико-хімічні властивості елементів перехідних груп помітно зале-



жать від зовнішніх умов, які можуть вплинути на електронну конфігурацію.

В періодичній таблиці окремо винесені лантаноїди та актиноїди, які відносять до першої та другої групи *рідкісно-земельних* елементів відповідно. Вони мають дуже подібні фізико-хімічні властивості, оскільки в них відрізняються внутрішні глибинні електронні підоболонки, а зовнішні є дуже подібними між собою

Теоретичне пояснення періодичного закону Д.І. Менделєєва – одного з найважливіших законів природознавства – є найбільшим досягненням сучасної фізики.

#### § 4.7. Характеристичні рентгенівські спектри

В § 1.6 було розглянуто природу гальмівного рентгенівського випромінювання. Нагадаємо, що воно має суцільний спектр (рис.11) і не залежить від матеріалу антикатада рентгенівської трубки (рис.10).

Якщо збільшити напругу на рентгенівській трубці до значення, більшого за деяке критичне ( $\sim 10\text{кВ}$ ), що залежить від матеріалу антикатада, то на фоні суцільного спектра з'являються вузькі гострі максимуми інтенсивності (рис.45), тобто виникає **лінійчастий рентгенівський спектр** [1, 2, 5]. Спектри складаються з невеликої кількості ліній, які групуються в серії і позначаються так:  $K_a, K_b, K_g, L_a, L_b, M_a$  і т.п. Лінійчасті рентгенівські спектри різних речовин подібні між собою, однак при збільшенні порядкового номера  $Z$  речовини антикатада весь рентгенівський спектр лише зміщується в короткохвильову частину, не змінюючи своєї структури (рис.46). У зв'язку з тим, що лінійчастий рентгенівський спектр залежить від природи речовин, його називають **характеристичним**.

В 1913 р. англійський фізик Г.Мозлі встановив закон, який зв'язує положення спектральної лінії з атомним номером  $Z$

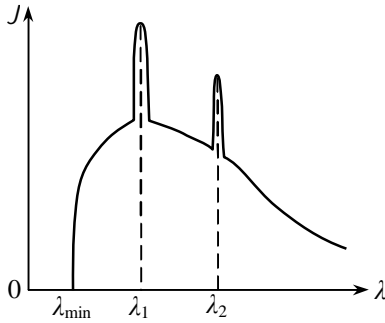


Рис.45

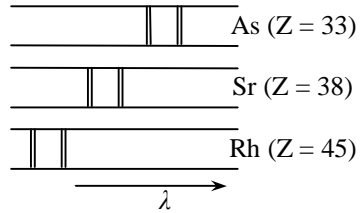


Рис.46

матеріалу антикатада: *корені квадратні з частоти є лінійною функцією від порядкового номера елемента  $Z$* . Закон Мозлі виражається формулою

$$\sqrt{n} = C(Z - s), \quad (4-31)$$

де  $C$  і  $s$  - константи.

• Пояснити походження лінійчастих спектрів можна на підставі будови електронних шарів багатоелектронних атомів. Електрони атома розміщуються в шарах  $K, L, M, N, O$  і т.д. Найнижчий рівень енергії має  $K$ -шар ( $n = 1$ ), далі йде  $L$ -шар ( $n = 2$ ) і т.д. (рис. 47). Електрон, що бомбардує антикатод,

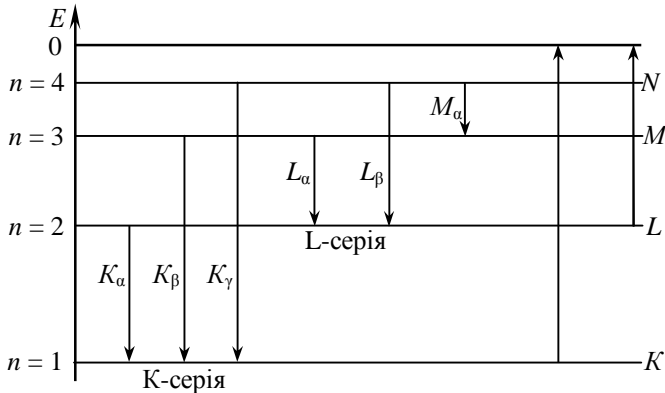


Рис.47

може вирвати з  $K$  – шару один з двох електронів атома (збудження  $K$  – серії). Рентгенівський квант виникає при переході електронів з шарів  $L$ ,  $M$ ,  $N$  і так далі на вивільнене місце в  $K$  – шарі, що призводить до виникнення  $K$  – серії.

$K$  – серія обов'язково супроводжується іншими серіями  $L$ ,  $M$ ,  $N$  і так далі, оскільки при переході на  $K$  – шар виникають вакантні місця в шарах  $L$ ,  $M$ ,  $N$  та ін. Відповідні електронні переходи між шарами можна спрощено представити за допомогою кругових орбіт електронів в атомі (рис.48).

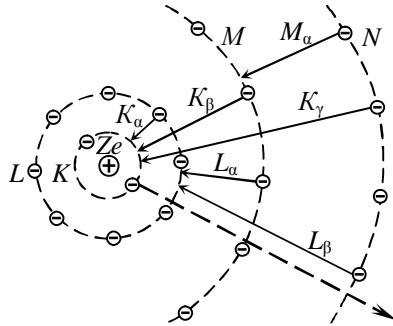


Рис.48

•Формули для визначення ліній спектра характеристичного рентгенівського випромінювання записуються в такому вигляді, що дуже нагадують формулу Бальмера (4-2) і, разом з тим, узгоджуються з законом Мозлі (4-31). Для ліній  $K$ -серії

$$n^* = \frac{1}{I} = R(Z - s_K)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4-32)$$

де  $n^*$  - хвильове спектроскопічне число,  $I$  - довжина хвилі,  $R$  - стала Рідберга,  $Z$  - атомний номер елемента,  $s_K$  - стала екранування для  $K$ -серії,  $n = 2, 3, 4, \dots$  - цілі числа, що відповідають номеру шару, з якого переходять електрони. Для  $K$ -серії стала екранування  $s_K = 1$ . Смысл цієї величини полягає в тому, що на електрон, який переходить з  $L$ -шару на  $K$ -шар, діє не весь заряд ядра  $+Ze$ , а ослаблений одним елек-

троном в  $K$ -шарі заряд  $(Z-1)e$ .

Для  $L$ -серії спектральні лінії визначаються згідно з формулою

$$n^* = \frac{1}{l} = R(Z - s_L)^2 \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4-33)$$

де  $n = 3, 4, 5, \dots$  - цілі числа, а стала екранування  $s_L = 7,5$ .

Характеристичні рентгенівські спектри дозволяють точно встановити атомний номер  $Z$  елемента, що в свій час допомогло в розумінні розміщення хімічних елементів у періодичній таблиці Менделєєва. Закон Мозлі дуже точно виконується для  $K$ - і  $L$ -серій, але дає відхилення для  $M$ - і  $N$ -серій при великих атомних номерах  $Z$ .

#### § 4.8. Утворення молекул. Типи хімічного зв'язку

**Молекулами** називають найменші частинки речовини, які є носіями всіх її основних хімічних і фізичних властивостей і можуть самостійно існувати. Молекули можуть складатися з різних або однакових атомів, об'єднаних в одне ціле хімічними зв'язками. Властивість атомів до утворення хімічного зв'язку з іншими атомами характеризується їх **валентністю**. Квантова механіка пояснює хімічні властивості елементів, розглядаючи будову зовнішніх електронних шарів атомів [1, 2, 7, 10, 11].

Хімічний зв'язок між атомами буває таких основних типів: **іонний** (або *гетерополярний*), **ковалентний** (або *гомеополярний*) та мішаний.

• Якщо один атом передає іншому один або кілька електронів, то виникають іони з електричним зарядом різного знака, між якими виникає електричне притягання. Сили електростатичного притягання врівноважуються відштовхуванням електронних оболонок атомів на певних відстанях, характерних для даної пари іонів. Так виникає *іонний* зв'язок. Передача електронів від одного атома до іншого можлива

тоді, коли такий процес є енергетично вигідним. Відрив електрона від атома потребує певних затрат енергії. Найменшими вони є для лужних металів. Разом з тим, приєднання електрона до нейтрального атома супроводжується виділенням енергії. Виявляється, що найбільша енергія виділяється при приєднанні електрона до атомів галоїдів. Характерною особливістю утворення таких іонів є те, що у них електронні оболонки стають повністю забудовані. Якщо перехід електрона виявиться енергетично вигідним, то утворюється молекула, яка являє собою потенціальну яму для її складових.

Прикладами таких молекул, де яскраво виражений іонний тип хімічного зв'язку, є  $\text{NaCl}$ ,  $\text{LiF}$ ,  $\text{MgCl}_2$  та ін.

Дослідження речовини методами рентгеноструктурного аналізу дозволяє уявляти іон як сферу певного радіуса. Наприклад, іонний радіус в ангстремах для різних іонів такий:  $\text{Li}^+ - 0,60$ ,  $\text{Na}^+ - 0,95$ ,  $\text{K}^+ - 1,33$ ,  $\text{Cs}^+ - 1,69$ ,  $\text{F}^- - 1,36$ ,  $\text{Cl}^- - 1,81$ ,  $\text{Br}^- - 1,95$ ,  $\text{I}^- - 2,16$ .

Треба зауважити, що в твердому і розплавленому станах солей іони різного знака щільно оточують один одного, як

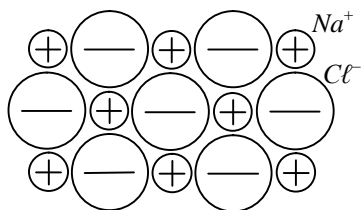


Рис.49

показано на рис.49, тому не можна вказати, які два іони різного знака утворюють молекулу, тобто поняття молекули втрачає свій початковий смисл. В розчинах солей та газоподібному стані поряд з молекулами іон-

ного типу існують окремо іони різного знака.

•**Ковалентний** хімічний зв'язок виникає між двома атомами за рахунок обміну валентними електронами з протилежними спінами. Ковалентний тип зв'язку характерний для молекул, що складаються з однакових атомів (наприклад,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ), з різних атомів ( $\text{NO}$ ,  $\text{CN}$  та ін.). Цей тип зв'язку між атомами існує в кристалах напівпровідників

Ge, Si, між атомами вуглецю C в алмазі і т.ін.

Розглянемо природу цього зв'язку на прикладі молекули водню  $H_2$ . Вона складається з двох атомів водню, тобто являє собою квантову систему з двох протонів і двох електронів (рис.50). Ядра (тобто протони  $a$  і  $b$ ) мають масу в 1836 разів більшу за масу електрона, тому вони рухаються

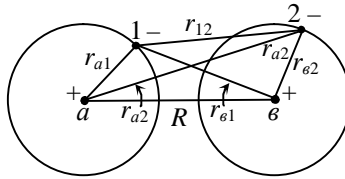


Рис.50

значно повільніше електронів 1 і 2. Потенціальна енергія системи в цілому складається з кулонівської взаємодії між двома електронами, двома протонами та кожним електроном і кожним протоном. Рівняння Шредінгера (3-7) для випадку нерухомих ядер має такий вигляд:

$$\Delta_1 \psi + \Delta_2 \psi + \frac{2m_e}{\hbar} \left[ E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b2}} \right) \right] \psi = 0$$

де  $\Delta_1$  та  $\Delta_2$  - оператори Лапласа для 1-го та 2-го електронів. Розв'язання цього рівняння Гайтлером і Лондоном (1927р.) показало, що власні значення енергії системи залежать від відстані між ядрами, тобто  $E = E(R)$ , а також від взаємної

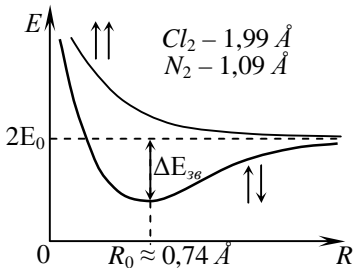


Рис.51

орієнтації спінів електронів (рис.51). Коли  $R \rightarrow \infty$ , тобто атоми не взаємодіють між собою, то енергія системи дорівнює  $2E_0$  ( $E_0$  - енергія ізолюваного атома водню в незбудженому стані. При зменшенні відстані  $R$  відбувається перекриття електронних

оболонки і збільшується ймовірність переходу електрона до “чужого” протона. Оскільки електрони водню перебувають в однаковому стані  $1s$ , то обмін електронами може відбуватися тільки за умови виконання принципу Паулі, тобто коли спіни антипаралельні. При цьому відбувається не просто накладання двох сферичних електронних хмаринок ізольованих атомів, а відбувається істотний перерозподіл електронної густини хмаринки. При об’єднанні електронів у молекулі відбувається “втягування” електронних хмаринок, і в просторі між ядрами електронна густина зростає (рис.52,а). Наявність над-

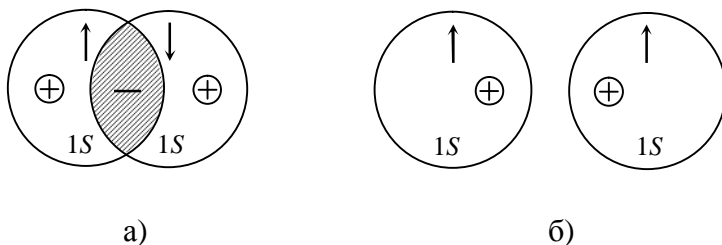


Рис.52

лишкового від’ємного електричного заряду призводить до виникнення сил притягання між ядрами. На якійсь відстані  $R_0$  між ядрами енергія системи двох атомів досягає мінімального значення. Це відповідає стійкому стану системи. Зменшення відстані між атомами призведе до зростання сил відштовхування між ядрами, а збільшення відстані – до зростання сил притягання. Для того, щоб розірвати зв’язок між атомами в молекулі, треба затратити енергію зв’язку  $\Delta E_{зв}$ .

Якщо спіни електронів ізольованих атомів будуть паралельні, то за принципом Паулі вони не можуть займати однаковий квантовий стан, обмін електронами стає неможливим. При зближенні таких атомів електронні хмаринки “уникають” перетину між собою, вони, навпаки, віддаляються (рис.52,б). Між атомами зростають сили кулонівського відштовхування, і молекула не утворюється.

Отже, в основі виникнення гомеополярного зв'язку лежить *обмінна взаємодія*, яка має квантову природу.

Відповідні розрахунки для відстані між ядрами в молекулах з ковалентним зв'язком дають результати, які добре узгоджуються з експериментальними даними: для  $\text{H}_2$  -  $R_0=0,74 \text{ \AA}$ , для  $\text{N}_2$  -  $R_0=1,09 \text{ \AA}$ , для  $\text{Cl}_2$  -  $R_0=1,99 \text{ \AA}$ , а енергія зв'язку молекул  $\Delta E_{\text{зв}}$  дорівнює кілька *електронвольт*.

Кожний атом може створювати обмежену кількість ковалентних зв'язків, в яких бере участь пара електронів з протилежними спінами. Хімічна валентність атома визначається кількістю електронів, які можуть взяти участь в обмінній взаємодії з іншим атомом. Слід також відмітити, що оскільки електронні хмаринки в станах  $p, d, f$  витягнуті в певних напрямках (див. рис. 35, в  $s$  - стані електронна хмаринка має сферичну симетрію), то ковалентний зв'язок, здійснюваний цими електронами, теж буде відповідним чином направлений. Квантова механіка дозволяє знайти кути, під якими напрямлені ковалентні зв'язки в молекулах та кристалах, тобто встановити їх просторову структуру.

•Строгий поділ на іонний та ковалентний тип зв'язку є певною мірою ідеалізацією. Насправді в реальних сполуках в різній мірі присутні обидва типи зв'язку. Якщо валентні електрони значно більше часу знаходяться біля одного з атомів у молекулі, то говорять про переважно іонний тип зв'язку. Якщо ж час перебування електронів приблизно однаковий біля кожного з атомів, то зв'язок називають ковалентним. В конкретних випадках можна приблизно вказати частку того або іншого типу зв'язку в молекулі або кристалі.

#### **§ 4.9. Енергетичні рівні молекул. Молекулярні спектри**

•Головним чином, зміна енергетичного стану молекули відбувається за рахунок зміни в **електронній конфігурації** зовнішніх (валентних) електронів атомів, з яких вона склада-



ється. Крім того, при кожній електронній конфігурації мають місце **коливання** ядер та **обертання** цілої молекули відносно її центра інерції. З цими видами рухів зв'язані запаси коливальної та обертальної енергії молекули. Виявляється, що окремі види молекулярних рухів, тобто електронний, коливальний та обертальний, практично не залежать один від одного. Тоді повну енергію молекули можна представити у вигляді

$$E = E_e + E_n + E_r, \quad (4-34)$$

де  $E_e$  - електронна енергія молекули, пов'язана з електронною конфігурацією;  $E_n$  - енергія молекули, пов'язана з коливаннями атомів у молекулі;  $E_r$  - енергія молекули, пов'язана з її обертанням навколо свого центра інерції.

Згідно з формулою (3-28) енергія гармонічного осцилятора квантується й визначається як

$$E_n = (v + 1/2) \cdot \hbar \omega_n, \quad (4-35)$$

де  $v = 0, 1, 2, \dots$  - коливальне квантове число.

Як відомо, кінетична енергія системи з моментом інерції  $I$ , яка обертається з кутовою швидкістю  $\omega_r$ , дорівнює

$$E_r = \frac{I \cdot \omega_r^2}{2} = \frac{(I \omega_r)^2}{2 \cdot I} = \frac{L^2}{2 \cdot I},$$

де  $L$  - момент імпульсу системи. Згідно з квантовою формулою (4-20) момент імпульсу дорівнює

$$L = \hbar \sqrt{J \cdot (J + 1)},$$

де  $J = 0, 1, 2, \dots$  - обертальне квантове число. Отже, обертальна енергія молекули теж квантується:

$$E_r = \frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2 \cdot I}. \quad (4-36)$$

Таким чином, повна енергія молекули дорівнює

$$E = E_e + \left( v + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \omega_n + \frac{\hbar^2 J(J + 1)}{2 \cdot I}. \quad (4-37)$$

•Відповідні розрахунки та дослід показують, що відстані між обертальними рівнями енергії значно менші, ніж відстані між коливальними рівнями, які в свою чергу набагато менші, ніж відстані між електронними рівнями, тобто

$$\Delta E_r \ll \Delta E_v \ll \Delta E_e. \quad (4-38)$$

У зв'язку з цим схема енергетичних рівнів двохатомної молекули має вигляд, як показано на рис.53. При переходах молекули з більш високих енергетичних рівнів на нижчі випромінюються кванти певної частоти.

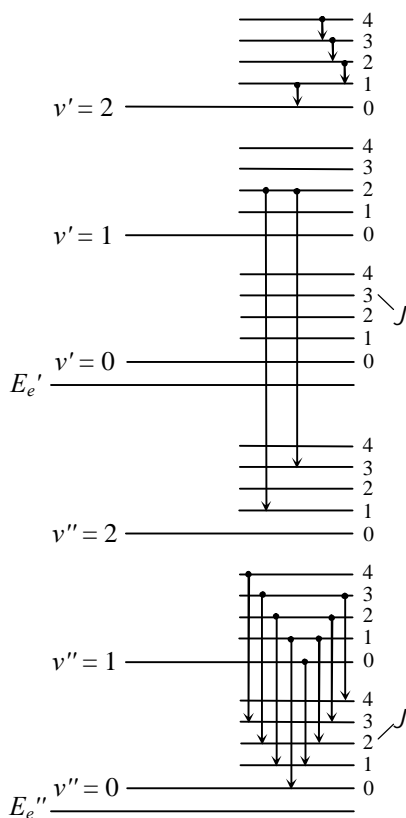


Рис.53

При більшому збудженні молекул виникають коливально-обертальні спектри, викликані переходами між обертальними рівнями сусідніх коливальних станів з дотриманням правила

кули з більш високих енергетичних рівнів на нижчі випромінюються кванти певної частоти. Так виникають молекулярні спектри. При переходах між рівнями діють правила добору для квантових чисел, тобто дозволяються такі переходи, коли

$$\Delta v = \pm 1 \quad \text{та} \quad \Delta J = \pm 1.$$

При незначних збудженнях молекули виникають лінії обертальних переходів. Оскільки відстань між обертальними рівнями мала, обертальні спектри являють собою смуги близько розташованих ліній в далекій інфрачервоній області ( $\lambda \sim 0,1 \dots 1 \text{ мм}$ ).

добору квантових чисел. Спектральні лінії цих переходів утворюють смуги в діапазоні близької інфрачервоної області ( $I \sim 3 \dots 50 \text{ мкм}$ ).

Якщо ще збільшити збудження, то у молекул з'являється електронно-коливальний спектр, викликаний переходами між коливальними рівнями сусідніх електронних станів  $E_e'$  та  $E_e''$ . Ці переходи утворюють спектральні смуги в ультрафіолетовій або видимій частині спектра ( $I \sim 0,1 \dots 0,7 \text{ мкм}$ ).

Дослідження молекулярних спектрів дозволяє детально з'ясувати взаємодію електромагнітного випромінювання різної частоти з речовиною. За допомогою молекулярних спектрів, одержаних з високою роздільною здатністю, вивчають особливості коливального та обертального руху молекул.

## Задачі

**4.1. Атом водню за теорією Бора.** Визначити орбітальну швидкість електрона в атомі водню згідно з борівською теорією.

Розв'язання. Електрон рухається по коловій орбіті під дією доцентрової сили, яка дорівнює кулонівській взаємодії між ядром атома водню й електроном. Для  $n$ -ої орбіти матимемо

$$\frac{mV_n^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n^2}. \quad (1)$$

Згідно з постулатом Бора про квантування орбіт (4-3)

$$mV_n r_n = n\hbar. \quad (2)$$

Виражаючи з рівняння (1) радіус орбіти  $r_n$  і підставляючи його в рівняння (2), після спрощень одержуємо

$$V_n = \frac{1}{n} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{\hbar},$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$  - номер борівської орбіти.

Робимо обчислення для першої орбіти ( $n = 1$ ):

$$V_1 = \frac{1}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1,6^2 \cdot 10^{-38}}{1,05 \cdot 10^{-34}} = 2,19 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

Для орбіти з номером  $n$  швидкість дорівнює

$$V_n = \frac{1}{n} \cdot V_1 = \frac{1}{n} \cdot 2,19 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

**4.2. Спектр атома водню.** Атомарний водень після збудження світлом з певною довжиною хвилі дає тільки три спектральні лінії. Знайти довжини хвиль цих ліній та вказати, яким серіям вони належать. Знайти також довжину хвилі, що відповідає границі серії Бальмера.

**Розв'язання.** Щоб знайти потрібні довжини хвиль, треба скористатися узагальненою формулою Бальмера (4-2). Крім того, ще треба з'ясувати, які значення чисел  $n$  і  $m$  потрібно підставляти в цю формулу. Для цього розглянемо рис.30. Відповідно до умови задачі атом водню був переведений із стану з найменшою енергією ( $n = 1$ ) в стан з  $n = 3$ . Із цього збудженого стану можливі переходи на рівні  $n = 1$ ,  $n = 2$ , а також потім з рівня  $n = 2$  на рівень  $n = 1$ . Таким чином, виникає дві лінії серії Лаймана ( $m = 1$ , а  $n = 2$  і  $3$ ) і одна лінія серії Бальмера ( $m = 2$ , а  $n = 3$ ). Для довжини хвилі з формули (4-2) одержуємо вираз

$$I = \left[ R \cdot \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \right]^{-1}. \quad (3)$$

Зробимо обчислення для ліній серії Лаймана:

$$I_{L1} = \left[ 1,097 \cdot 10^7 \cdot \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) \right]^{-1} = 1,22 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 1220 \text{ А},$$

$$I_{L2} = \left[ 1,097 \cdot 10^7 \cdot \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) \right]^{-1} = 1,03 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 1030 \text{ А}.$$

Обчислення для лінії серії Бальмера :

$$I_{B1} = \left[ 1,097 \cdot 10^7 \cdot \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \right]^{-1} = 6,56 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 6560 \text{ А}.$$

Для обчислення границі серії Бальмера в формулі ( 3 ) треба взяти  $m = 2$ , а  $n \rightarrow \infty$ . Тоді матимемо вираз

$$I_B = \frac{m^2}{R}.$$

Обчислюємо:

$$I_B = \frac{2^2}{1,097 \cdot 10^7} = 3,646 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 3646 \text{ А}.$$

**4.3. Орбітальні і спінові моменти.** Електрон знаходиться в атомі в  $f$ -стані. Знайти його орбітальний і спіновий моменти, а також кути їх можливої просторової орієнтації. Розв'язання. Для  $f$ -стану азимутальне квантове число  $l = 3$ . Орбітальний момент імпульсу визначається формулою (4-20), тобто

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (4)$$

Спін електрона знаходять за формулою (4-24), тобто

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad (5)$$

де  $s = 1/2$  -спінове квантове число.

Зробимо обчислення за формулами (4) і (5):

$$L = 1,05 \cdot 10^{-34} \sqrt{3 \cdot (3+1)} = 3,65 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с},$$

$$L_s = 1,05 \cdot 10^{-34} \sqrt{1/2 \cdot (1/2 + 1)} = 0,913 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}.$$

Проекція  $L$  на вісь  $z$  визначається формулою (4-21), тобто

$$L_z = m \hbar, \quad (6)$$

де магнітне квантове число при  $l = 3$  може набирати значення  $m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ . Кут між орбітальним моментом  $\vec{L}$  і віссю  $z$  знайдемо з виразу (див. рис.37)

$$\cos \alpha = \frac{L_z}{L} = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}},$$

звідки

$$a = \arccos(m/\sqrt{l(l+)}). \quad (7)$$

Обчислення за формулою (7) дають такі результати:

$a \approx 30^\circ; 54^\circ 50'; 73^\circ 15'; 90^\circ; 106^\circ 45'; 125^\circ 10'; 150^\circ$ .  
Проекція спіна на вісь  $z$  визначається за формулою (4-25), тобто

$$L_{sz} = m_s \mathbf{h}, \quad (8)$$

де квантове число  $m_s = \pm 1/2$ . Згідно з рис.40

$$\cos a_s = \frac{L_{sz}}{L_s} = \frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}},$$

звідки

$$a_s = \arccos(m_s / \sqrt{s(s+1)}). \quad (9)$$

Обчислення за формулою (9) дають такі результати:

$$a_s \approx 54^\circ 50'; 125^\circ 10'.$$

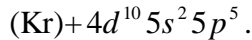
#### 4.4. Періодична система елементів Д.І.Менделєєва. Записати електронні конфігурації, що відповідають атомам заліза, йоду та цезію.

Розв'язання. Залізо **Fe** має атомний номер  $Z = 26$  і є елементом 4-го періоду таблиці Менделєєва. Третій період закінчується інертним газом аргон **Ar** ( $Z=18$ ). У нього заповнення електронних шарів і підоболонки відбувається послідовно без порушень, тому його електронна конфігурація має такий вигляд:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ . Згідно з правилом Маделунга після підоболонки  $3p$  ( $n+l=4$ ) має заповнюватись підоболонка  $4s$  ( $n+l=4$ ), а потім  $3d$ , для якої ( $n+l=5$ ). У заліза на 8 електронів більше, ніж в аргона, тому 2 з них розмістяться в підоболонці  $4s$ , а ще 6 – в підоболонці  $3d$ . Таким чином, для заліза **Fe** маємо

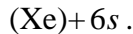
$$(\text{Ar}) + 3d^6 4s^2.$$

Йод **I** має атомний номер  $Z = 53$ , він є представником 5-го періоду. Четвертий період закінчується інертним газом криптон **Kr**, який має конфігурацію  $(\text{Ar}) + 3d^{10} 4s^2 4p^6$ .

Йод має на 17 електронів більше, ніж криптон. Згідно з правилом Маделунга після  $4p$  ( $n + l = 5$ ) повинна заповнюватись підоболонка  $5s$  ( $n + l = 5$ ), яка містить 2 електрони, потім  $4d$  ( $n + l = 6$ ), яка може містити 10 електронів і, нарешті, підоболонка  $5p$  ( $n + l = 6$ ), де може бути до шести електронів. Отже, електронна конфігурація йоду **I** буде такою:



Елемент цезій **Cs** має атомний номер  $Z = 55$ , він розпочинає 6-й період таблиці Менделєєва. П'ятий період закінчується інертним газом ксенон **Xe** ( $Z = 54$ ), і його електронна конфігурація така:  $(\text{Kr}) + 4d^{10} 5s^2 5p^6$ . У цезію на один електрон більше, і згідно з правилом Маделунга він має заповнювати підоболонку  $6s$  ( $n + l = 6$ ), оскільки для  $4f$  ( $n + l = 7$ ), для  $5d$  ( $n + l = 7$ ), для  $5f$  ( $n + l = 8$ ), для  $5g$  ( $n + l = 9$ ). Таким чином, електронна конфігурація цезію **Cs** є такою:



**4.5. Характеристичні рентгенівські спектри.** Знайти найменшу напругу, яку треба подати на рентгенівську трубку з мідним антикатодом, щоб збудити всі можливі лінії характеристичного рентгенівського спектра. Обчислити довжини хвиль  $K_a, K_b, L_a$  - ліній спектра.

**Р о з в' я з а н н я.** Щоб збудити всі можливі лінії характеристичного рентгенівського спектра, треба вирвати електрон з  $K$ -шару атома (рис.47). Для цього потрібна енергія, яка відповідає енергії кванта, що виникає при переході електрона зі стану  $n \rightarrow \infty$  у стан  $m = 1$ . Згідно з формулою (4-32) маємо

$$\frac{1}{I_{\infty}} = R(Z - 1)^2. \quad (10)$$

Енергія цього кванта має дорівнювати енергії, яку набирає електрон в рентгенівській трубці, тобто

$$hn = \frac{hc}{I_{\infty}} = eU. \quad (11)$$

Підставляючи (10) в (11), для напруги одержуємо

$$U = \frac{hc}{I_{\infty}e} = \frac{R(Z-1)^2 hc}{e}. \quad (12)$$

Для Cu атомний номер  $Z=29$ . Виконаємо обчислення за формулою (12):

$$U = \frac{1,097 \cdot 10^7 (29-1)^2 \cdot 6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-19}} \approx 10,7 \text{ кВ}.$$

Для обчислення довжин хвиль  $K$ -серії скористаємось формулою (4-32). Після нескладних перетворень маємо:

$$I = 1/[R(Z-1)^2(1-1/n^2)]. \quad (13)$$

Обчислюємо, підставляючи  $n = 2$ , а потім  $n = 3$ :

$$\text{лінія } K_a \quad I = 1/[1,097 \cdot 10^7 (29-1)^2 (1-1/2^2)] = 1,55 \text{ А};$$

$$\text{лінія } K_b \quad I = 1/[1,097 \cdot 10^7 (29-1)^2 (1-1/3^2)] = 1,31 \text{ А}.$$

Для обчислення довжин хвиль  $L$ -серії скористаємось формулою (4-33), підставляючи  $n = 3$ :

$$\text{лінія } L_a \quad I = 1/[1,097 \cdot 10^7 (29-1)^2 (1/2^2 - 1/3^2)] = 14,2 \text{ А}.$$

### Стислі висновки

1. Атом водню являє собою для електрона нескінченно глибоку потенціальну яму з краями, що розходяться. Вигляд потенціальної ями визначається потенціальною енергією взаємодії електрона й ядра.
2. Розв'язання рівняння Шредінгера для атома водню призводить до поняття квантування енергії, моменту імпульсу та проекції моменту імпульсу на виділений



напрям, що характеризується відповідними квантовими числами  $n, l, m$ .

3. Електрон має внутрішню невід'ємну властивість – власний момент імпульсу (спін). Просторова орієнтація спіна характеризується спіновим квантовим числом  $m_s$ . Четвірка квантових чисел  $n, l, m, m_s$  повністю визначає стан електрона в атомі.
4. У квантовій механіці електрон в атомі розглядається не як частинка, що рухається по орбіті, а розподіленим у просторі у вигляді електронної хмаринки. Форма хмаринки залежить від стану електрона в атомі, тобто від квантових чисел  $n, l, m$ .
5. Атом водню має лінійчастий спектр. Це пояснюється дискретністю енергетичних рівнів електрона в атомі. При переходах електронів з одного рівня на інший поглинається або випускається квант енергії  $h\nu$ . Для атома водню лінії спектра описуються узагальненою формулою Бальмера.
6. Теорія Бора для атома водню була проміжною теорією між класичними уявленнями і послідовною квантовою теорією. Хоча в ній і пояснюється лінійчаста природа спектра атома водню, введення постулатів Бора виглядає досить штучним і непослідовним.
7. Існує суто квантово-механічний закон – принцип Паулі, який поширюється тільки на мікрочастинки з півцілим спіном. Згідно з цим принципом у квантовій системі (атомі) не може бути 2 електрони з однаковим набором усіх чотирьох квантових чисел  $n, l, m, m_s$ .
8. У багатоелектронних атомах енергія електронів залежить від усіх квантових чисел  $n, l, m, m_s$ . Енергетичні рівні в атомах заповнюються електронами з урахуванням принципу Паулі, причому заповнення відбувається послідовно, починаючи з нижчих рівнів.

9. Квантова механіка дає пояснення періодичної повторюваності фізико-хімічних властивостей елементів таблиці Д.І.Менделєєва. Пояснення таке: при забудові електронних підоболонки і шарів періодично повторюються електронні конфігурації підоболонки зовнішніх електронів, які визначають валентність, оптичні, магнітні властивості тощо.
10. При збудженні багатоелектронних атомів виникає лінійчастий характеристичний спектр рентгенівського випромінювання. Поява ліній спектра пояснюється переходами електронів між  $K$ -,  $L$ -,  $M$ -,  $N$ - шарами з більш високих енергетичних станів у нижчі стани. Для цього в рентгенівській трубці треба створити напругу кілька десятків кіловольт. Характеристичний лінійчастий спектр накладається на суцільний спектр гальмівного рентгенівського випромінювання.
11. Молекули – найменші частинки, що несуть всі фізичні та хімічні властивості речовини, - складаються з двох (або більше) однакових (або різних) атомів, між якими виникає хімічний зв'язок. Квантова механіка, пояснюючи його природу, розглядає два типи зв'язку – іонний (або гетерополярний) та ковалентний (або гомеополярний).
12. Іонний тип зв'язку пояснюється кулонівським притяганням між іонами протилежного знака, які утворились завдяки переходу одного або більше електронів від одного атома до іншого. Ковалентний зв'язок виникає завдяки обміну між атомами валентними електронами з антипаралельними спінами, в результаті чого між атомами утворюється підвищений електронний заряд, що й утримує позитивно заряджені ядра атомів у молекулі. Процес утворення молекул має місце тоді, коли це енергетично вигідно, причому в обох випадках електронні оболонки атомів стають повністю забудованими.
13. Розглядаючи зміни енергії молекули, виділяють такі її

складові: *електронну*, зумовлену конфігурацією валентних електронів; *коливальну*, створювану коливаннями атомів у складі молекули; *обертальну*, яка пов'язана з процесом обертання молекули навколо її центра інерції. Значення енергії всіх складових квантуються згідно з відповідними квантовими законами, так що дозволені енергетичні рівні молекули являють собою досить складну систему. У зв'язку з цим спектри молекул дуже складні, вони мають вигляд системи смуг, які складаються з густо розташованих спектральних ліній.

### *Питання для самоконтролю*

1. Як пояснюється походження лінійчастого спектра атома водню? Записати узагальнену формулу Бальмера.
2. Як описується поведінка електрона в атомі водню в квантовій механіці?
3. Що характеризують квантові числа? Які значення вони можуть набирати?
4. У чому полягає принцип Паулі?
5. Що називають електронними оболонками та підоболонками багатоелектронних атомів? Як вони формуються?
6. Що таке електронна конфігурація атома?
7. Як квантова механіка пояснює періодичну повторюваність фізико-хімічних властивостей елементів таблиці Д.І.Менделєєва?
8. Як утворюється характеристичне рентгенівське випромінювання?
9. Пояснити природу іонного та ковалентного типу зв'язку між атомами в молекулах.
10. Чому молекулярні спектри мають набагато складніший вигляд, ніж атомні?